

مقدمة تاريخية في كيمياء الكم

كيمياء الكم Quantum Chemistry ، هو التخصص القائم على استخدام قوانين وقواعد ميكانيكا الكم Quantum Mechanics في الكيمياء لتفسير ظواهر دون ذرية على مستوى الإلكترونات خاصة . ببساطة هو فرع من الكيمياء يمكن استخدامه لتفسير ظواهر كيميائية معينة عن طريق ميكانيكا الكم .

اهتمامنا في كيمياء الكم سوف يكون بنوع معين من الجسيمات Particles دون الذرية وهي الإلكترونات لما لها من أهمية في تكوين الروابط الكيميائية بين الذرات لتكوين الجزيئات والتي تنطبق عليها فعلاً قوانين ميكانيكا الكم .

ماذا تعني كلمة كم Quantum ؟

هي كلمة لاتينية تعني كميات متقطعة بمعنى اننا في الفيزياء الحديثة أو ميكانيكا الكم ، نتعامل مع الكميات المتقطعة المتدفقة مثل نقط المطر وطلقات المدفع الرشاش وليس مع الكميات المتصلة المناسبة مثل الماء في الأنهار.

ماذا تعني كلمة ميكانيكا Mechanics ؟

تأتي هنا بمدلولها العام الذي يعني مبادئ التشغيل أي تعمل بالنظرية الكمية .

هناك تساؤلات كثيرة يتم طرحها ؟

- كيف تتحرك الإلكترونات حول النواة ؟
- لماذا تضل الإلكترونات في حالة دوران مستمر حول النواة وفي نفس الوقت فهي لا تنجذب للنواة مع العلم ان النواة تحمل شحنة موجبة أما الإلكترونات فهي سالبة الشحنة .
- كيف تتكون الروابط الكيميائية ؟
- عندما ترتبط الذرات لتكوين الجزيئات من خلال تبادل أو حتى مشاركة الإلكترونات ، فكيف تكون المشاركة فعلياً ؟ أو حتى التبادل هل هو مشاركة بالمفهوم الكلاسيكي ؟ أم ان له مفهوم آخر ؟
- تترتب العناصر في الجدول الدوري بحيث في كل عنصر يزيد الكترون واحد عن العنصر الذي يسبقه ، الملاحظ هنا انه عند زيادة عدد الإلكترونات فان حجم الذرة سوف يزداد تدريجياً من العناصر الأخف ،

الى العناصر الأثقل ولكن عندما تزداد تلك الالكترونات فكيف ستدور وأين ؟ وهل لها مسارات ومدارات محددة ؟ وهل تلك المسارات مكممه بحيث تكون لها مدارات ذات طاقات محددة ؟
- ماهي أشكال الاوربيتالات الذرية ؟

للإجابة عن جميع الأسئلة التي طرحت ، هنا يأتي دور كيمياء الكم .

تعتبر معادلة شرودنكر **The Schrodinger Equation** ، من أهم أسس ميكانيكا الكم التي وضعها عالم الرياضيات العبقري شرودنكر . الميزة التي أضافتها لنا معادلات شرودنكر هي إنها تعطينا نتائج رياضية لما يحدث على المستوى دون الذري مع العلم ان النتائج الرياضية في كثير من الأحيان لا يمكن تخيلها في عالمنا المعروف وأيضا لا يمكن لنا أن نرى تلك الجسيمات وهي تتحرك ابدا فهذا مستحيل .

المشكلة إننا في حالة الجسيمات دون الذرية ، انه لا يمكننا قياس مكان الالكترون أو طاقته في نفس اللحظة طبقا لمبدأ عدم التأكد لهايزنبرخ ، لذا قام شرودنكر بوضع فكرة عبقرية وهي تحديد أكثر الأماكن التي يحتمل تواجد الالكترونات حول النواة فيها وهي تسمى الاوربيتالات **Orbitals** ، وهي تعتبر مستويات طاقة فكل اوربيتال له طاقة محددة ، وأمكن تحديد شكل الاوربيتالات أو طاقاتها من حلول معادلات شرودنكر .

مقارنة بين الفيزياء الكلاسيكية والفيزياء الحديثة

الفيزياء الكلاسيكية بنيت على اعتماد يسمى بالاحتمية **Determinism** والمؤسس لهذه الفيزياء هو العالم نيوتن وقوانينه للحركة . وتعرف الفيزياء الكلاسيكية على إنها فرع من فروع الفيزياء ، والذي لا يستخدم الميكانيكا الكمية ولا النظرية النسبية الخاصة في تفسير الظواهر الطبيعية التي تقوم بدراستها مثل الحركة والجاذبية ونظرية ماكسويل في الكهرباء والمغناطيسية والبصريات والديناميكا الحرارية والميكانيكا الإحصائية الكلاسيكية (مثل توزيع ماكسويل – بولتزمان) وغيرها . والتي بدورها تقشل في تفسير الظواهر عند التحدث عن المستوى الذري أو السرعات القريبة من سرعة الضوء أو كليهما .

واجه علماء الفيزياء أزمة كبيرة عندما قاموا بدراسة الجسيمات المتناهية في الصغر فهي ترفض الانصياع للقوانين المعروفة والتي ثبت صحتها عندما طبقت على الأجسام الكبيرة . وبدأ صرح الفيزياء الكلاسيكية ينهار ويتهاوى عند اكتشاف بعض الحقائق ومنها حقيقة ثبات سرعة الضوء .

فشل كل نموذج كلاسيكي للذرة وصفه العلماء في تفسير سبب الأشعة الغامضة التي تنبعث من عناصر اليورانيوم والراديوم وعناصر ثقيلة أخرى . هذه الأشعة تظل تنبعث من هذه العناصر بصفة مستمرة لمدة آلاف السنين وملايين السنين بدون مصدر خارجي للطاقة .

الأكثر غرابة بالنسبة للفيزياء الحديثة هو أنها تتعامل مع الطبيعة الثنائية للمادة بمعنى الشيء الواحد يمكن اعتباره جسيماً ويمكن اعتباره موجه في نفس الوقت . تخيل أنك تتعامل مع شيء موجود ، وغير موجود في نفس الوقت .

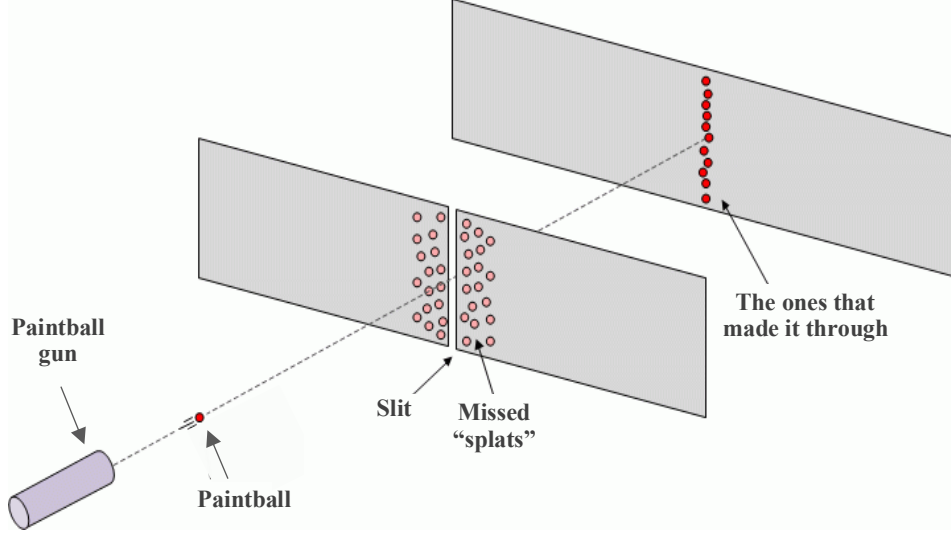
ولم يتخيل أحد بعد فترة قصيرة ستحدث ثورة كبيرة في عالم الفيزياء على يد اثنان من أشهر العلماء وهما ماكس بلانك وهو مؤسس علم الكوانتم وأول من استخدم هذا اللفظ ، والعالم أينشتاين صاحب النظرية النسبية والظاهرة الكهروضوئية . ورياضيا ، تعتبر المعادلات الفيزيائية الكلاسيكية هي تلك التي لا تحتوي على ثابت بلانك .

الطبيعة الثنائية أو المزدوجة للإلكترون

جاء العالم توماس يونغ Thomas Young ، قبل العالم أينشتاين وعمل تجربة شهيرة وهي تجربة الشقين Double Slit Experiment والتي بموجبها تم اعتبار الضوء موجات لا دقائق وكذلك من خلالها تم إثبات ان الإلكترون يمتلك طبيعة ثنائية موجية وجسيمية . وهي إحدى أهم التجارب الفيزيائية التي أسهمت في البحث في طبيعة الضوء وإثبات طبيعته الموجية ، ثم استخدمت في إثبات وجود خاصية موجية لجميع الجسيمات مثل الإلكترونات وغيرها .

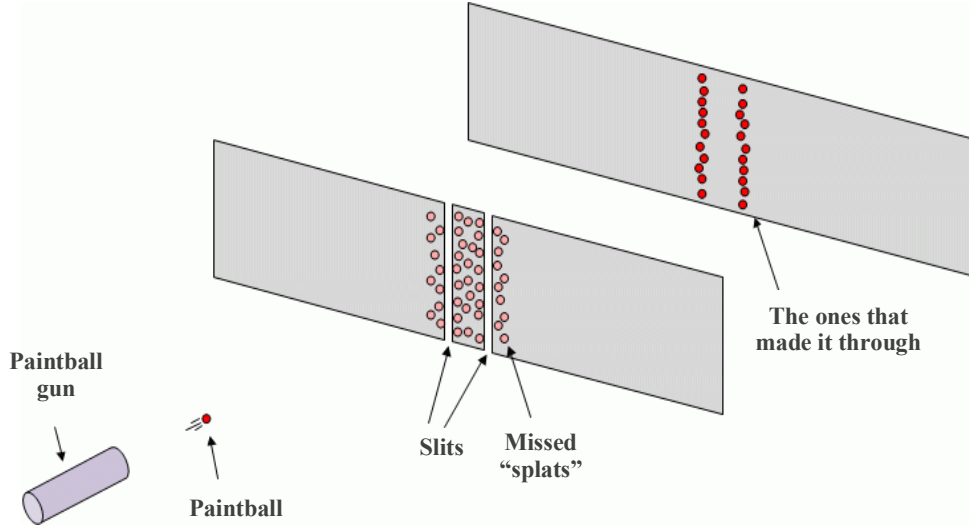
تجربة شقي يونغ لدراسة سلوك الجسيمات الصغيرة

حيث نلاحظ تشكل خط واحد من هذه الكرات الزجاجية متطابق بالشكل مع الشق . أي ان الكرات سلكت سلوك الجسيمات .



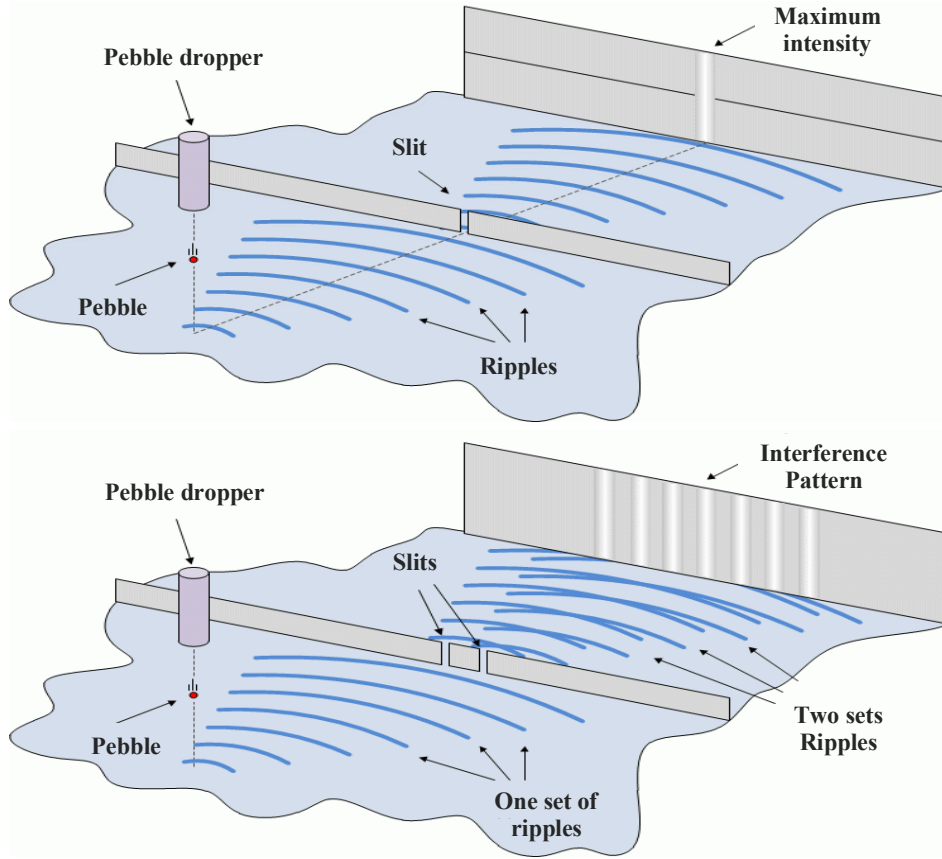
شكل 1.1 : تجربة الشق المزدوج ، تظهر الصورة الناتجة ما هو المتوقع رؤيته عند إطلاق الكرات الزجاجية عبر الشق .

والأن لو قمنا بإضافة شق آخر



شكل 1.2 : تجربة الشق المزدوج ، تظهر الصورة الناتجة ما هو المتوقع رؤيته عند إطلاق الكرات الزجاجية عبر الشق حيث نلاحظ تكون حزمتين من الكرات الزجاجية .

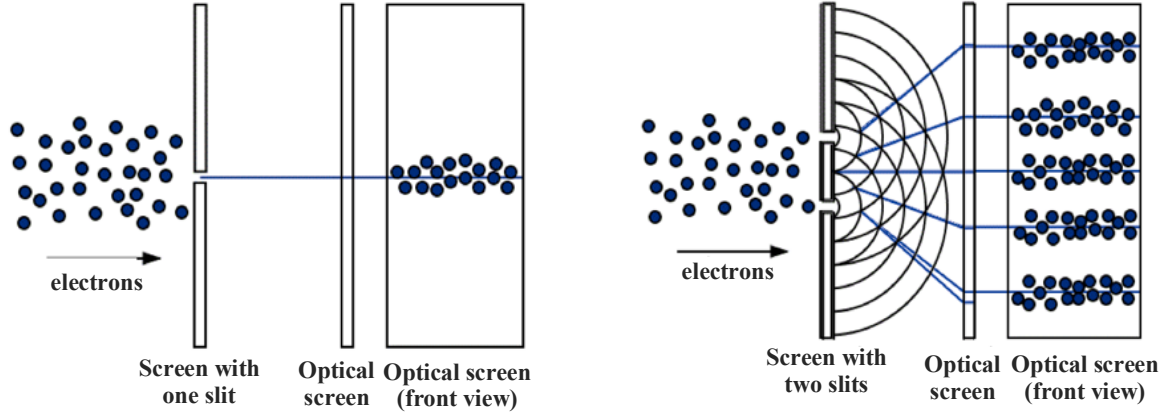
2 . 3 . 1 تجربة شقي يونغ لدراسة سلوك الموجات



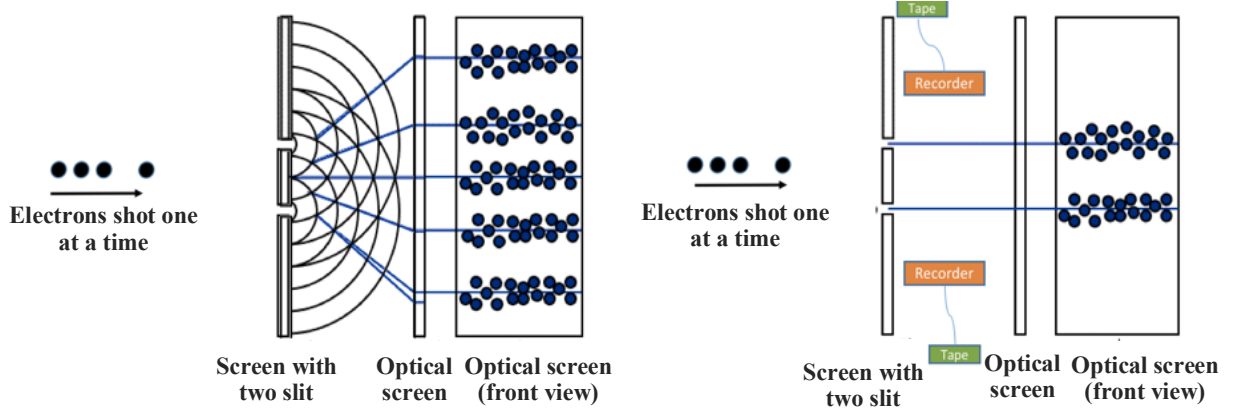
شكل 1 . 3 : تجربة الشق المزدوج ، تظهر الصورة الناتجة ما يحدث فعلياً عندما تطلق الموجات عبر الشقوق حيث نحصل على نمط التداخل البناء والتداخل الهدام .

إذن حينما نقذف بالأشياء عبر الشقين فأنتنا نحصل على أثنتين من الحزم الساطعة اذا كانت جسيمات . ولكن في حالة الموجات فأنتنا نحصل على نمط تداخل من عدد من الحزم .

1.3.3 تجربة شقي يونغ لدراسة سلوك الإلكترونات



شكل 1.4 : تجربة الشق المزدوج ، تظهر الصورة الناتجة ما يحدث فعلياً عندما يتم إطلاق تيار من الإلكترونات عبر شق واحد (يتصرف الإلكترون كجسيم) وعبر شقين (يتصرف الإلكترون كموجة) .



شكل 1.5 : تجربة الشق المزدوج ، تظهر الصورة الناتجة ما يحدث فعلياً عندما يتم إطلاق الإلكترون بشكل منفرد عبر الشقين ودون وجود أجهزة مراقبة (يتصرف الإلكترون كموجة) وعند وضع أجهزة المراقبة (يتصرف الإلكترون كجسيم) .

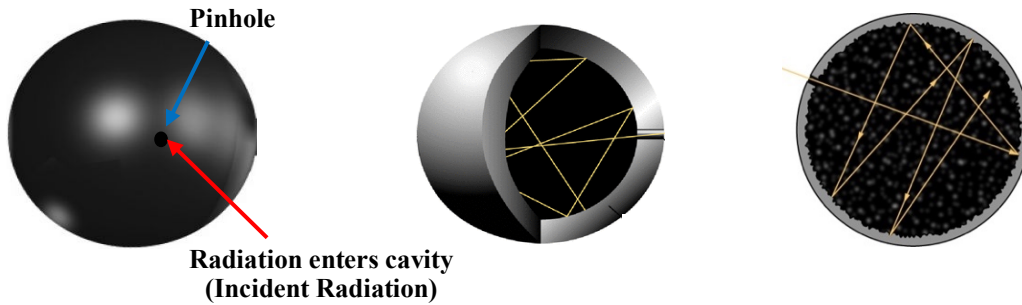
أخفقت الفيزياء الكلاسيكية في تفسير المسائل المتعلقة بالظواهر الذرية والجزيئية وهي تتضمن تفسير دوران الإلكترونات حول النواة ، إشعاع الجسم الأسود ، التأثير الكهروضوئي، تفسير الاطياف الذرية والجزيئية . ولكن هذا لا يعني ان الفيزياء الكلاسيكية خاطئة ، فالفيزياء الكلاسيكية هي نظرية منقوصة وليست خاطئة ، لكنها تكون منقوصة بشكل كبير عندما يتم التعامل مع الوحدات الصغيرة (حجم ذري، حيث تستعمل ميكانيكا الكم) أو الوحدات السريعة (قرب سرعة الضوء، حيث تتولاها النسبية). للأشياء اليومية التي هي أكبر بكثير من الذرات والأبطأ كثيراً من سرعة الضوء تعمل الفيزياء الكلاسيكية بشكل ممتاز ويكون من السهل استعمالها بدلاً من ميكانيكا الكم أو النسبية اللذان يتطلبان معلومات حسابية شاملة ومعقدة .

تفسير دوران الإلكترونات حول النواة .

طبقاً لتفسير الفيزياء الكلاسيكية فقد تم وضع تصور لشكل الذرة مشابه لشكل مجموعتنا الشمسية حيث تتمركز النواة في الوسط وتدور الإلكترونات حولها . غير أنه وبحسب مبادئ الفيزياء الكلاسيكية نفسها فإن الإلكترونات في هذا النموذج ستعرض لتسارع جذب مركزي نتيجة دورانها حول النواة مما سيؤدي إلى بثها لإشعاع كهرومغناطيسي وهذا بدوره يترتب عليه أن الإلكترونات ستفقد طاقتها شيئاً فشيئاً وتقترّب نتيجة لذلك من النواة حتى تصطدم بها في جزء من الثانية مما يؤدي إلى انهيار الذرة . وهذا التصور غير واقعي ومن الواضح بأن هذا لا يحدث ، وذلك تنبؤ خاطئ، ومع تطور التجارب والتجارب الأخرى والتي لا تفسرها الفيزياء الكلاسيكية جعل العلماء يبحثون عن شيء ما جديد ليوضح ويفسر العلم على المستوى الذري . لذا جاءت الحاجة لنظرية جديدة تعطي نموذجاً آخر لتكوين الذرة .

إشعاع الجسم الأسود Black – body radiation

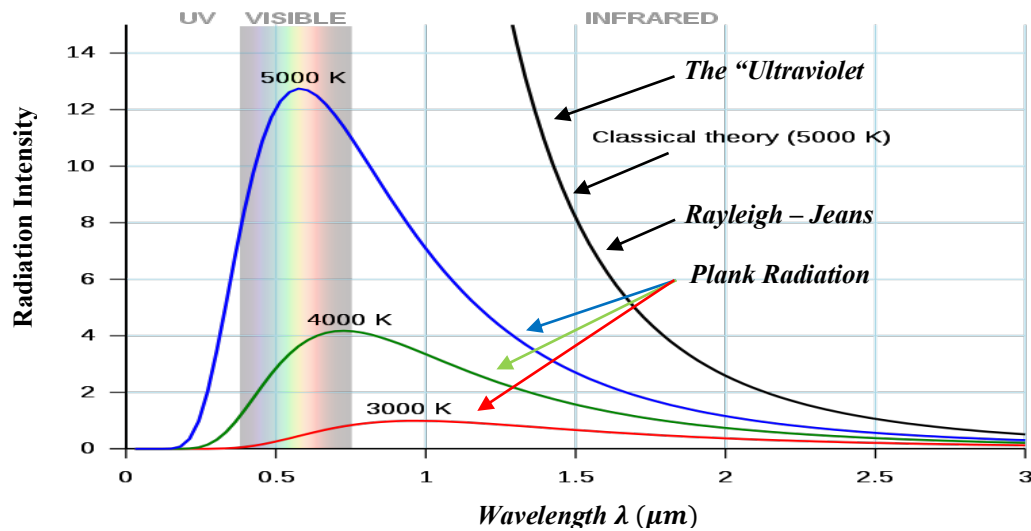
ان الجسم الأسود هو الجسم أو المادة التي تمتص جميع الأشعة الكهرومغناطيسية الساقطة عليه . وأحسن نموذج تجريبي أو تقريبي للجسم الأسود هو مجوف كروي ذو ثقب صغير جداً يسمح بدخول الأشعة . عند دخول الأشعة من خلال هذا الثقب سيتم حجزها داخل المجوف وبالتالي امتصاصها. وقد سمي جسماً أسوداً لان اللون الأسود هو اللون الذي يمتص كل الضوء الساقط عليه ولا ينعكس منه شيئاً .



شكل 6 . 1 : يمثل التمثيل المختبري للجسم الأسود وهو عبارة عن حاوية مغلقة محتوية على ثقب صغير . الإشعاع ينعكس عدة مرات داخل الحاوية حتى الوصول لتوازن حراري بين الجدران عند درجة حرارة T .

لذلك لا يوجد جسم أسود مثالي لأنه لا يوجد جسم يمتص الأطوال الموجية ويشعها دون فقد في الطاقة .

يبين (الشكل 7 . 1) عدة أطياف أجسام سوداء بدرجات حرارية مختلفة . نلاحظ أنه كلما قلت الحرارة تنزاح القمة باتجاه الأطوال الموجية الأطول ، أي باتجاه اللون الأحمر في نطاق الضوء المرئي . فعند حرارة 3000 K يكون أكبر قدر للطاقة المنبعثة داخل النطاق المرئي عند الطول الموجي الذي يمثل اللون الأحمر . لهذا ، عند تسخين الحديد يبدأ أولاً بالتحول للون الأحمر . ثم إن تم تسخينه أكثر فأكثر يبدأ الإشعاع الحراري المنبعث منه يعطي أكبر قدر طاقة منبعثة (تمثل بقمة المنحنى) عند الطول الموجي الذي يمثل اللون الأصفر.



شكل 7 . 1 : يمثل منحنيات إشعاع الجسم الأسود عند درجات حرارية مختلفة . مع انخفاض درجة الحرارة ، تنتقل ذروة منحنى إشعاع الجسم الأسود إلى شدة منخفضة وأطوال موجية أطول . يتم مقارنة الرسم البياني لإشعاع الجسم الأسود أيضاً مع النموذج الكلاسيكي لرايلي وجينز .

فشلت الفيزياء الكلاسيكية في تفسير الطيف الإشعاعي للجسم الأسود على جميع نطاقات التردد والتي أصبحت تعرف بكارثة الأشعة فوق البنفسجية **Ultraviolet Catastrophe** ، فقد كان هناك تناقض واضح بين النظرية والتجربة . حيث توضح النظرية الكلاسيكية انه كلما ازداد تردد الضوء ، تزداد كثافة الطاقة الإشعاعية لتقترب من اللانهاية كما موضح في المخطط أعلاه (الشكل 7 . 1) . بينما النتائج التجريبية تتناقض مع النظرية وعملياً تبين ان كثافة الطاقة الإشعاعية تميل الى الانخفاض مع زيادة التردد في طيف الأشعة فوق البنفسجية . وعند المقارنة بين النماذج الكلاسيكية والكمومية لإشعاع الجسم الأسود فأن النموذج الكمي يفسر القيم التجريبية في جميع مجالات التردد ، بينما يفشل النموذج الكلاسيكي عند الترددات

المنخفضة . والسبب الرئيسي لذلك ان النظرية الكلاسيكية تتعامل مع الطاقة على إنها مستمرة وليست مجزأة ، كما ان النظرية الكلاسيكية غير منطقية لأنه واعتماداً على هذه الصيغة فان مجرد وجودنا بالقرب من موقد مثلاً كافي لان نحترق بالكامل نظراً لتصادم الشدة الى اللانهاية حسب قانون رايلي – جيمس وسمي هذا التناقض بالكارثة فوق البنفسجية .

تطورت التجارب و العلاقات الرياضية لتفسير ظاهرة الجسم الأسود الى أن تم وضع التفسير الصحيح من قبل العالم ماكس بلانك بالاعتماد على مبدأ تكميم الطاقة وأدناه بعض القوانين التي وضعت لتفسير ظاهرة الجسم الأسود:

(أ) قانون التوزيع للعالم واين ويليام Wilhelm Wien displacement law

وضع العالم واين ويليام Wilhelm Wien في عام ١٨٩٣م هذا القانون ، وتوصل الى علاقة رياضية تربط بين درجة حرارة الجسم الأسود وطول موجة الأشعة التي يصدرها .

$$T \lambda_{max} = \frac{1}{5} C_2 \quad , \quad C_2 = 1.44 \text{ cm K}$$

$$\lambda_{max} = 2900 \text{ nm} \quad \text{at} \quad 1000 \text{ K}$$

C_2 : سمي بثابت الإشعاع الثاني Second radiation constant .

وجد العالم واين ويليام انه كلما ازدادت درجة حرارة الجسم قصر طول موجات إشعاعه ، كما انه وجد ان حاصل ضرب درجة الحرارة وطول الموجة التي تحدث عندها أكبر كمية إشعاع يساوي قيمة ثابتة مقدارها $(\frac{1}{5} C_2)$. لاحظ العلماء ان النتائج والتوافق بين هذه العلاقة الرياضية والتجربة لم يكن تاما في منطقة الأشعة تحت الحمراء ويبدو ان المشكلة في هذه العلاقة نفسها .

(ب) قانون ستيفان – بولتزمان Stefan – Boltzmann law

تم وضع هذه الصيغة من قبل العالم ستيفان Stefan عام ١٨٧٩م ، وينص قانون ستيفان – بولتزمان على ان الطاقة المنبعثة Total energy density في وحدة المساحة هي تتناسب مع درجة الحرارة المطلقة ذات الأس الرابع .

$$\varepsilon = \sigma T^4 \quad , \quad \varepsilon = \frac{E}{V}$$

$$\sigma = 5.67 \times 10^{-8} W m K^{-1}$$

σ : ثابت ستيفان – بولتزمان Stefan – Boltzmann constant

ε : تمثل الطاقة الكلية المنبعثة في وحدة المساحة Total energy density

E : تمثل الطاقة الكلية للأشعة الكهرومغناطيسية التي امتصت من قبل الجسم الأسود

Total electromagnetic energy

V : تمثل حجم المنطقة Volume of region ، T : تمثل درجة الحرارة المطلقة

ويمكن من خلال قانون ستيفان – بولتزمان ، معرفة مقدار ما سيصدره الجسم الأسود من ضوء ، بعد أن يمتص كل ما وقع عليه من ضوء ليصبح مشعاً ، كما يمكننا القانون من معرفة الطول الموجي لموجات الضوء التي يصدرها الجسم الأسود ، من خلال المقياس الوحيد الذي يمثله القانون وهو درجة الحرارة .

(ج) قانون رايلي – جينس Rayleih – Jeans law

اعتبر هذان العالمان ان الجسم الأسود مكون من عدد من المتذبذبات المشحونة التي تتحرك حركة توافقية بسيطة Simple Harmonic Motion وهذه المتذبذبات المشحونة تطلق أشعة كهرومغناطيسية أثناء حركتها بحيث تكون كثافة توزيع الطاقة المنبعثة من الجسم الأسود مساوية لكثافة طاقة المتذبذبات عند الاتزان الحراري .

$$\rho(v, T) dv = \frac{8 \pi v^2}{c^3} \bar{E}_{osc} dv$$

ρ : تمثل الكثافة الطيفية Spectral density أو هي دالة تمثل التوزيع الترددي لأشعة الجسم الأسود المنبعثة وهي دالة لدرجة الحرارة T والتردد v ووحدتها $(frequency)^{-1} \times (volume)^{-1} \times energy$ ، c تمثل سرعة الضوء .

$\bar{E}_{osc}$: تمثل معدل الطاقة للمتذبذب ثنائي القطب Oscillating dipole في الجسم الصلب .

dv : نلاحظ انه موجود في جانبي المعادلة وذلك لكوننا هنا نحسب الطاقة التي تلاحظ في مدى التردد dv المتمركز في منطقة التردد v .

في النظرية الكلاسيكية أعطت تخمين لقيمة معدل الطاقة للمتذبذب $\bar{E}_{osc}$ والذي يرتبط ببساطة بدرجة الحرارة المطلقة T :

$$\bar{E}_{osc} = k T$$

حيث k يمثل ثابت بولتزمان $Boltzmann\ constant = 1.381 \times 10^{-23} J K^{-1}$

بجمع العلاقتين أعلاه فتكون النتيجة تمثل معدل الطاقة لوحدة الحجم في منطقة التردد بين $(v \text{ و } v + dv)$ والتي تكون في حالة توازن حراري داخل الجسم الأسود عند درجة حرارة T :

$$\rho(v, T) dv = \frac{8 \pi k T v^2}{c^3} dv$$

هذه العلاقة تعطي احتمالية الكثافة الطيفية المنبعثة من الجسم الأسود وهي التي تحدد نتائج الشكل (7 . 1) . هذا القانون ينجح مع الأطوال الموجية الطويلة (الأصغر تردد) ولكن يفشل مع الأطوال الموجية القصيرة (الأعلى تردد) أي تنحرف القياسات وسميت هذه المشكلة وقتها بالكارثة فوق البنفسجية *Ultraviolet Catastrophe* .

(د) قانون ماكس بلانك *The Plank distribution law*

استطاع العالم الألماني ماكس بلانك في عام ١٩٠٠ م ، تفسير ظاهرة إشعاع الجسم الأسود بالاعتماد على مبدأ تكميم الطاقة ونجح في تفسير منحنى إشعاع الجسم الأسود عند الأطوال الموجية الطويلة والقصيرة .

تخيل بلانك ان الفقاعة التي تمثل الجسم الأسود مؤلفة من ذرات أو جسيمات هزازة أو هزازات كالنوابض ، تقوم بامتصاص الطاقة مما يؤدي الى اهتزازها بشكل أكبر واعتبر ان هذه الهزازات هي الذرات رغم ان بلانك حينها لم يكن مقتنعاً بوجود الذرة . هذه الهزازات تمتلك تواتر معين للاهتزاز ، والتواتر هو عدد الاهتزازات في الثانية الواحدة . وأيضاً فلكل إشعاع كهرومغناطيسي طول موجة وتواتر محددين إضافة الى انه يحمل طاقة معينة تتناسب مع التواتر (أي ان كل تواتر يكافئ كمية طاقة محددة) . الآن اذا قدمنا لهذه الهزازات (أو النوابض) كمية من الطاقة على شكل موجات كهرومغناطيسية فان كل نابض سيمتص الموجة ذات التواتر الذي يتناسب مع تواتر اهتزازة ، أي انه سيمتص الإشعاع الذي يساوي تواتره تواتر اهتزاز النابض نفسه . وبما انه لكل نابض تواتره الخاص به ، فان كل نابض سيمتص تواتراً معيناً (طاقة معينة) وبالتالي

ستتوزع الطاقة بشكل معين . بمعنى آخر ان هذا الافتراض يعامل الطاقة على شكل جزيئات منفردة من الطاقة سميت حينها بالكلمات quanta .

وضع بلانك بعض الافتراضات المهمة :

- ١ – ينبعث الإشعاع من الجسم الأسود الساخن نتيجة لاهتزاز جزيئات أو ذرات سطحه .
- ٢ – ان هذه المهتزازات لا تبعث على شكل طيف متصل (مستمر) وإنما على شكل كمات (زخات) quanta .
- ٣ – كمية الطاقة المنبعثة أو الممتصة من المتذبذب في الجسم الأسود تتناسب مع تردده أي ان :

$$\Delta E \propto \nu \quad \Rightarrow \quad \Delta E = h \nu$$

حيث h يمثل ثابت بلانك $blank constant (h) = 6.626 \times 10^{-34} J.S$

- ٤ – ان الكم من طاقة المتذبذب تأخذ قيم محددة (مكممه) أي ان :

$$E_n = n h \nu$$

حيث n تمثل عدد الكم الرئيسي Principle quantum number ويأخذ أعداد صحيحة موجبة ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$) . فاذا كانت ($n = 0$) يكون المتذبذب في أدنى قيمة له ويسمى المستوى الأرضي Ground level ، أما اذا كانت ($n = 1$) فان المتذبذب يكون في مستوى طاقة رقم (1) وهكذا . ومن هنا نلاحظ ان بلانك أدخل مبدأ التكميم على المتذبذبات في الجسم الأسود وانها لها طاقات محددة وقيم محددة بالعدد الكمي (n) ولاوجود لقيم متصلة للطاقة كما افترض العالمان رايلي – جينز . وعند امتصاص أشعة أو انبعاثها من الجسم الأسود فان طاقتها تساوي فرق الطاقة بين مستويات الطاقة للمتذبذبات بحيث ان :

$$\because E_1 = h \nu \quad \& \quad E_2 = 2 h \nu \quad \Rightarrow \quad \therefore \Delta E = E_2 - E_1 = 2 h \nu - h \nu = h \nu$$

باستخدام فرضية بلانك وبعض العلاقات الناتجة من الفيزياء الكلاسيكية ، استطاع وضع تعبير رياضي للتوزيع الطاقوي في الجسم الأسود سميت بقانون بلانك :

$$\bar{E}_{osc} = \frac{h v}{e^{h v / k T} - 1}$$

من الضروري جداً للحصول علي قيم تقريبية لـ $\bar{E}_{osc}$ من العلاقة أعلاه وضع شرطين : عند درجات الحرارة العالية حيث $(h v / k T < 1)$ و عند درجات الحرارة الواطئة حيث $(h v / k T > 1)$. ولاحظ انه عند درجات الحرارة الواطئة فان المقدار $(e^{h v / k T})$ يكون كبير جداً ولذلك فان قيمة $\bar{E}_{osc}$ سوف تقترب من الصفر . وبالتعويض في قانون رايلي – جينس نحصل على :

$$\rho(v, T) dv = \frac{8 \pi h v^3}{c^3} \cdot \frac{1}{e^{h v / k T} - 1} dv$$

$$\therefore \rho(v, T) dv = \frac{8 \pi h v^3}{c^3} \cdot (e^{h v / k T} - 1)^{-1} dv$$

قيمة الثابت h كانت غير معروفة للعالم ماكس بلانك وقد استخدمه كمعامل للحصول على نتائج تتطابق من النتائج التجريبية ، وعندما قام بإعادة جميع التجارب العملية عند جميع درجات الحرارة فوجد ان جميع القياسات تكون متطابقة مع النتائج العملية عندما تكون قيمة هذا الثابت مساوية الى :

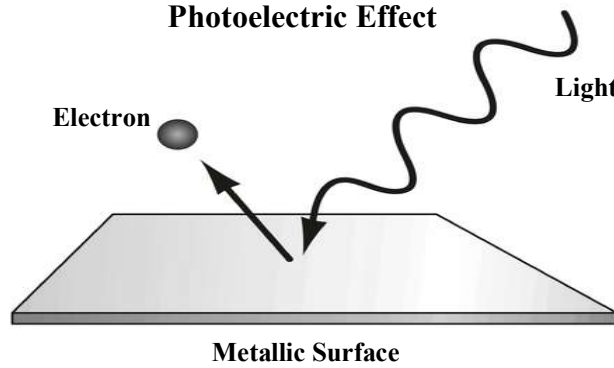
$$h = 6.62606957 \times 10^{-34} J . s$$

المعادلة الأخيرة معروفة بتوزيع بلانك وتتطابق مع التوزيع المشاهد تجريبياً .

Photoelectric effect

التأثير الكهروضوئي

التأثير الكهروضوئي يحدث عند تسليط أشعة كهرومغناطيسية – أي ضوء – على سطح معدن مؤدية الى انبعاث إلكترونات من المعدن ، فالإلكترونات تمتص طاقة من الضوء وبذلك تكتسب طاقة كافية لمغادرة المعدن (الشكل 1 . 8) .



شكل 1 . 8 : يوضح ظاهرة التأثير الكهروضوئي

وقد بينت نتائج العالم لينارد Lenard العملية بأن :

أولاً – الإلكترونات تنبعث فقط عندما يكون تردد الضوء الساقط يتجاوز حد أدنى من التردد يسمى بتردد العتبة Threshold frequency (ν_0) . وان قيمة ν_0 تختلف من معدن لآخر وهي تقع ضمن المنطقة فوق البنفسجية لمعظم المعادن .

ثانياً – زيادة شدة الضوء الساقط سيزيد من عدد الإلكترونات المنبعثة ولكنها لا تؤثر في الطاقة الحركية للإلكترونات المنبعثة .

ثالثاً – زيادة تردد الضوء الساقط سيزيد الطاقة الحركية للإلكترونات المنبعثة .

استفاد العالم أينشتاين من مفهوم التكميم الطاقى energy quantization للأشعة الكهرومغناطيسية لتفسير النتائج العملية في ظاهرة التأثير الكهروضوئي .

اقترح أينشتاين التالي :

١ - ان الضوء يمتلك خواصا موجية إضافة لذلك يمكن أن يؤخذ على أساس انه متكون من كيانات جسيمية وكمات quanta .

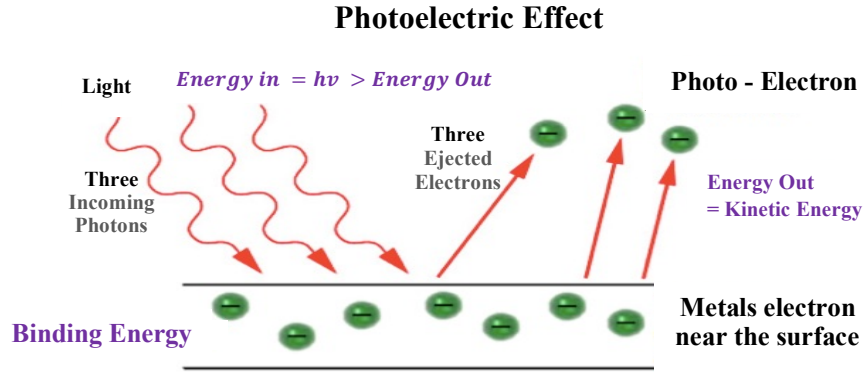
٢ - كل كم من الضوء له طاقة $h\nu$ ، وهذه الكيانات تسمى فوتونات Photons وان الطاقة في الضوء هي مجموع طاقات الفوتونات المنفردة .

٣ - يحدث التأثير الكهروضوئي عندما يرتطم فوتون لإلكترون في المعدن . هذا الفوتون سيختفي وان طاقته $h\nu$ تنتقل الى الإلكترون .

٤ - جزء من الطاقة التي تمتصها الإلكترونات سوف تستخدم في محاولة التخلص من القوى التي تربطها بالمعدن . والطاقة الإضافية المتبقية تظهر بشكل طاقة حركية يحملها الإلكترون المنبعث . وحسب قانون حفظ الطاقة فأن :

$$E = h\nu = \phi + K_E = \phi + \frac{1}{2} m V^2$$

حيث ان ϕ هي دالة الشغل Work function وهي أقل طاقة يحتاجها الإلكترون للتخلص من المعدن .
 $\frac{1}{2} m V^2$ هي الطاقة الحركية (K_E) للإلكترون الطليق (الشكل 9 . 1) .



Photoelectron Energy = Light Energy in - Binding Energy

$$KE_{\text{photoelectron}} = h\nu - \phi$$

٥ - إذا كانت $h\nu < \phi$ ، أي ان الفوتون له طاقة غير كافية في السماح للإلكترون في مغادرة المعدن ومن ثم لا يحدث التأثير الكهروضوئي (الشكل 10. 1). بمعنى آخر سوف تكون الطاقة الحركية للإلكترون مساوية للصفر أي ان :

$$\therefore K_E = 0 \quad \Rightarrow \quad \therefore \phi = h\nu_o$$

$h\nu_o$ هي الطاقة الحرجة بدون ملاحظة أي تأثير كهروضوئي . حيث ان ν_o هو التردد الحرج للضوء الساقط أو أقل تردد الذي لا تحدث عنده هذه الظاهرة .

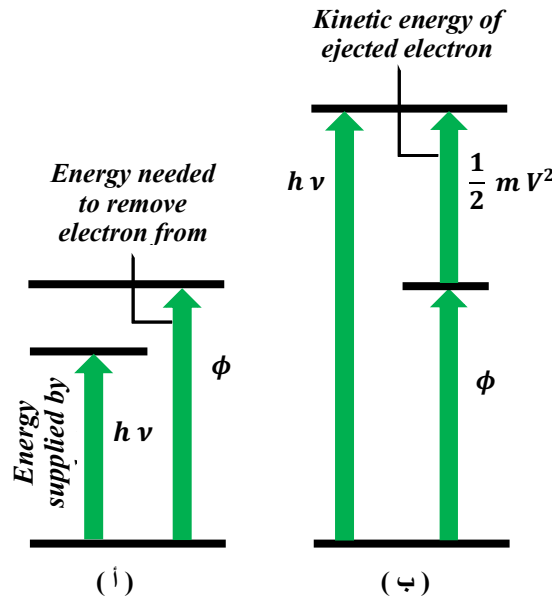
والاشتقاق التالي يوضح العلاقة بين الطاقة الحركية والتردد الحرج :

$$\therefore E = h\nu = \phi + K_E$$

$$\therefore E = h\nu = h\nu_o + K_E$$

$$\therefore K_E = h\nu - h\nu_o = h(\nu - \nu_o)$$

٦ - إن قيمة ϕ تختلف من معدن لآخر وتكون أقلها بالنسبة للمعادن القلوية .



شكل 10. 1 : يوضح تفسير التأثير الكهروضوئي إذا فرض بأن الطاقة متناسبة مع تردد الإشعاع ، (أ) : يبين إن طاقة الفوتون غير كافية لتحرير الإلكترون من سطح المعدن ، (ب) يبين إن طاقة الفوتون أكثر من كافية لتحرير الإلكترون من سطح المعدن ، الطاقة الزائدة تستخدم كطاقة حركية لتحرير الإلكترون

تفسير الاطياف الذرية والجزيئية

تعتبر النظرية الكلاسيكية أيضاً أن ألوان الطيف الذري يجب أن يغطي جميع الأطوال الموجية بنفس الشدة ، لكن لاحظ الفيزيائيون أن النتائج التجريبية تناقض ذلك بشدة حيث تصدر الذرات المختلفة أطيافاً (موجات ضوئية) لها أطوال موجية خاصة ومحددة جداً. ولم تتمكن النظرية الكلاسيكية من إعطاء قيم مضبوطة لترددات الخطوط الطيفية أو حتى قيم قريبة منها وخلال هذه الفترة توصل العالم بالمر Balmer وريديبرج Rydberg وآخرين إلى إيجاد علاقة تجريبية تعطي الترددات المضبوطة لخطوط طيف الهيدروجين :

$$\frac{\nu}{c} = \frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_b^2} - \frac{1}{n_a^2} \right)$$

ولم يوجد تفسير لهذه العلاقة التجريبية إلى أن جاء العالم بور وبين إن إنبعثت ترددات معينة من الضوء من ذرات الهيدروجين يشير إلى أن ذرة الهيدروجين موجودة فقط في حالات طاقة معينة .

هناك نوعان من الطيف هما :

١ – الطيف المستمر (المتصل) Continuous Spectrum

يتكون الطيف المستمر من حزمة غير متقطعة من ألوان وأطوال جميع الموجات المرئية وذلك مثل الطيف الذي تعطيه غالب المواد الصلبة عند درجات الحرارة العالية . فلا يمكن تحديد عدم غياب لون فراغات داكنة عند تحليل الطيف بالمطياف (الشكل 11 . 1) .

٢ – الطيف الخطي ، المنفصل ، المتقطع (الطيف الذري)

يتكون الطيف الخطي لمادة من نمط لخطوط مضيئة على أرضية داكنة . مثل طيف الامتصاص Absorption Spectrum وطيف الانبعاث Emission Spectrum (الشكل 11 . 1) .

Types of Spectrums



Continuous Spectrum

All colors of the spectrum are shown (some occupy a smaller space on the spectrum)



Emission Spectrum

Only the wavelengths emitted (given off) are visible



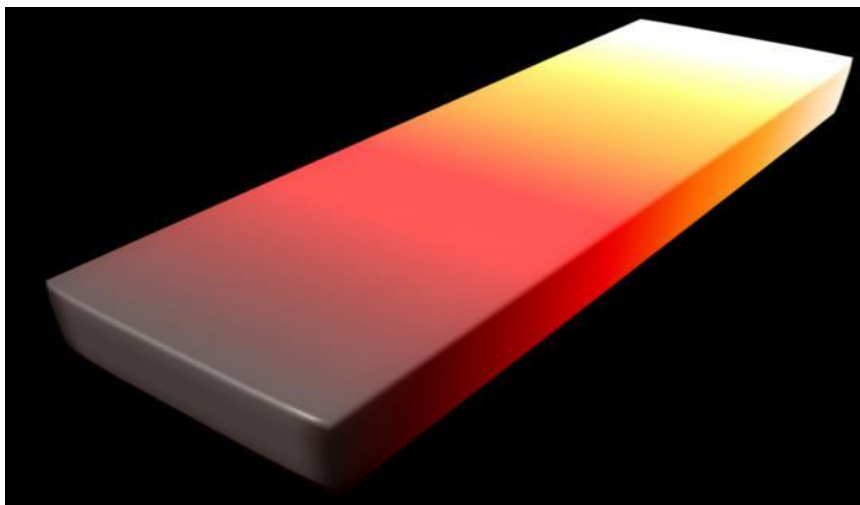
Absorption Spectrum

All wavelengths of color are seen. Only the ones emitted from the light source are missing (absorbed by gases)

شكل 1. 11 : يوضح الأنواع الثلاثة من أشكال الطيف ، طيف المستمر ، طيف الانبعاث ، طيف الامتصاص .

شكل 1. 12 : يوضح موقع طيف الأشعة المرئية في طيف الموجات الكهرومغناطيسية الأشعة الكهرومغناطيسية .

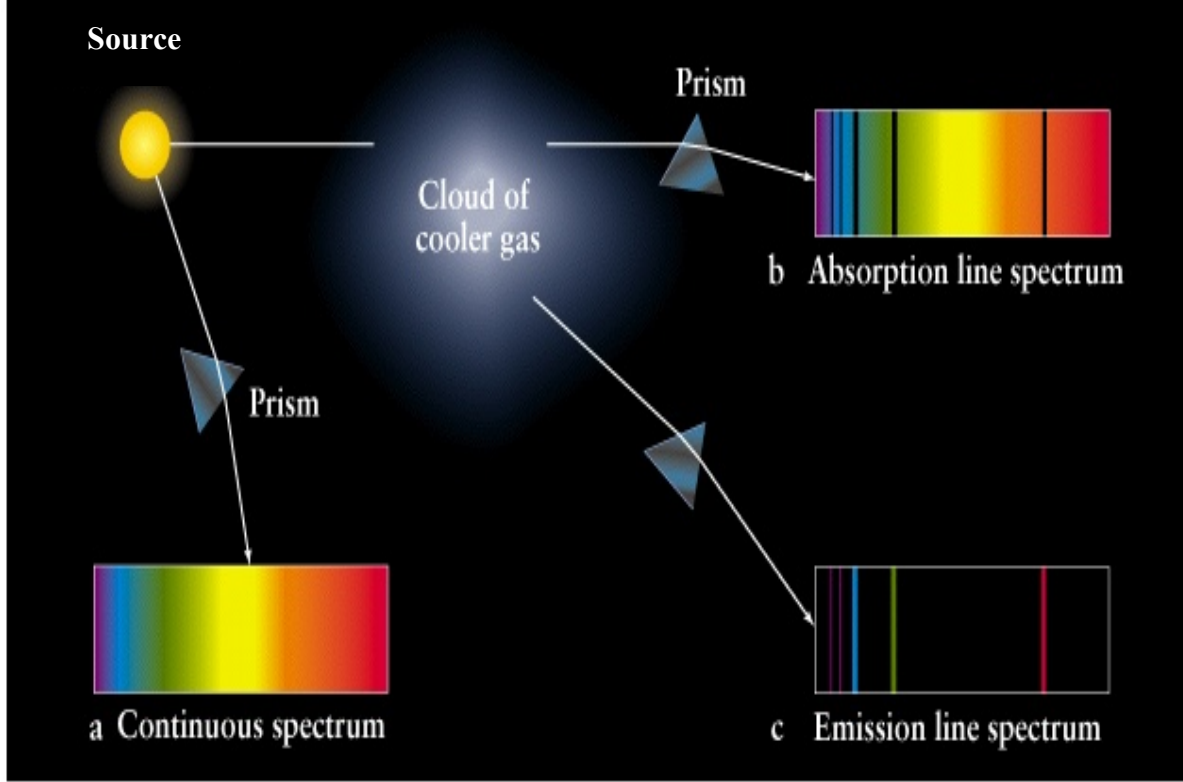
كذلك ممكن ملاحظة ألوان الطيف بوضوح عند انبعاث الإشعاع الحراري لجسم عند تسخينه (الشكل 1. 13) ، في درجة الحرارة المنخفضة تقع الموجات المنبعثة من الأجسام في منطقة الأمواج تحت الحمراء (أمواج غير مرئية) ولهذا السبب تظهر الأجسام في بداية التسخين معتمة (سوداء) . عندما تزداد درجة حرارة الجسم يبدأ بالتوهج بلون يميل الى الأحمر فالبرتقالي . عندما تصبح درجة حرارته عالية الى حد كبير فإن توهج الجسم يصبح أبيض أي يشع أطوال موجية تقع في منطقة الطيف المرئي . إذن الإشعاع الحراري يتدرج ابتداء من الأشعة تحت الحمراء ثم اللون الأحمر وعندما تكتمل ألوان الطيف السبعة يظهر باللون الأبيض اي ان طيف الإشعاع الحراري هو طيف متصل . طيف الإشعاع الحراري هو طيف متصل يحوي جميع الأطوال الموجية المختلفة ، البعض منها مرئية والبعض الآخر غير مرئية لأنها تقع في منطقتي الأشعة تحت الحمراء أو فوق البنفسجية .



شكل 13 . 1 : يوضح ألوان الطيف السبعة عند تسخين قطعة من الحديد .

وطيف العناصر الكيميائية عبارة عن طيف خطي ، والطيف الخطي هو الطيف الذي يحتوي على عدد محدود من الأطوال الموجية مثل طيف عنصر الهيدروجين (H) والزنابق (Hg) والنيون (Ne) . و أثبت العالم الألماني كيرشوف عام 1859 م بأنه (عندما تنثر العناصر الكيميائية بالتسخين تشع نفس الأطوال الموجية التي تمتصها وان لكل عنصر لون خاص يمتصه (لكل عنصر بصمة) . وقد استخدمت هذه الخاصية في القرن التاسع عشر للكشف عن المعادن والتميز بينها .

و طيف الانبعاث للعناصر Emission Spectrum هو خاصية مميزة لكل عنصر كيميائي ، فلا يوجد عنصران يحملان نفس طيف الانبعاث ، لذا فهو يعتبر بصمة العنصر ، حيث يمكن معرفة العنصر عن طريق قياس الطيف الخاص به . أما طيف الامتصاص للعناصر Absorption Spectrum فينشأ عندما يمر شعاع ضوء أبيض خلال ذلك العنصر أو بخار العنصر فينتج طيف به خطوط سوداء عند ترددات محددة ومميزة للعنصر . وطيف الامتصاص هو عكس طيف الانبعاث الذري . (الشكل 14 . 1) يوضح كيفية تكون طيف الانبعاث والإمتصاص للعناصر .



شكل 14 . 1 : يوضح آلية تكوين الطيف المستمر وطيف الإمتصاص وطيف الانبعاث .

تفسير طيف الامتصاص والانبعاث

عند مرور ضوء الشمس بأطيافه المختلفة (ألوانه السبعة) خلال أبخرة بعض العناصر فتمتص هذه العناصر الأطياف الخطية الخاصة بها فيظهر مكانها خطوطاً سوداء (معتمة) . أي ان ذرات العنصر تمتص كمية محددة من الطاقة مما يسبب إثارة الكثرونات هذه الذرات نتيجة اكتساب طاقة مما يؤدي الى قذف بعض الإلكترونات الى مستوى أعلى من المستوى الذي كانت فيه وفي هذه الحالة يقال إن الذرات في حالة إثارة Excitation . وعندما تعود هذه الذرات الى حالة الاستقرار ثانياً (بعد زوال المؤثر) Ground State فإنها سوف تطلق الطاقة التي امتصتها ثانياً على شكل إشعاع (أما في مجال الضوء المرئي أو غير المرئي) حيث يسمى الإشعاع المنطلق بطيف الانبعاث Emission Spectrum .

مبدأ اللادقة The Uncertainty Principle

اكتشف العالم هايزنبرك Heisenberg مبدأ اللادقة في عام 1927 م ، ويلاحظ ان الحجم الصغير لثابت بلانك يجعل مبدأ اللادقة للأجسام الكبيرة المرئية Macroscopic Particles لا معنى له .

$$\Delta P_x . \Delta X \geq \frac{h}{4\pi} , \quad \because P = m V \Rightarrow \therefore \Delta P = m \Delta V$$

ΔP_x : يعبر عن اللادقة (الخطأ) في الزخم الخطي الموازي لمحور x ، بمعنى عدم التأكد في كمية الحركة ، ΔX : يعبر عن اللادقة (الخطأ) في الموقع على طول ذلك المحور ، ΔV : اللادقة (الخطأ) في السرعة (الإنطلاق) .

المعادلة أعلاه توضح ان حاصل ضرب عدم التأكد في تعيين موضع الجسيم في عدم التأكد في تعيين كمية حركته لابد أن يكون يساوي أو أكبر من المقدار $(h/4\pi)$ ولا يمكن ان يكون حاصل الضرب هذا مساويا للصفر .

من الصيغ الأخرى لمبدأ عدم التأكد ان الطاقة والزمن يحكما نفس العلاقة :

$$\Delta E . \Delta t \geq \frac{h}{4\pi}$$

ΔE : عدم التأكد لقيمة الطاقة على حساب الزمن ، Δt : عدم التأكد في معلومية الزمن على حساب الطاقة .

1 . 6 . 1 تعريفات مبدأ الشك :

- إنه يستحيل عمليا في آن واحد تحديد سرعة ومكان جسيم متناهي في الصغر (الإلكترون) ولكن التحدث بلغة الاحتمالات هو الأقرب للصواب .
- إنه كلما زادت الدقة في تحديد موقع الإلكترون قلت الدقة في تحديد زخمه وكلما زادت الدقة في تحديد زخمه قلت الدقة في تحديد موقعه .
- إنه لا يمكن تحديد خاصيتين مقاستين من خواص جملة كمومية إلا ضمن حدود معينة من الدقة ، أي ان تحديد أحد الخاصيتين بدقة متناهية (ذات عدم تأكد ضئيل) يستتبع عدم تأكد كبير في قياس الخاصية الأخرى .

- أصبحت الصيغة العامة لمبدأ اللادقة : إنه كلما زادت المعرفة بكمية معينة قلت المعرفة بالكمية الأخرى وكلما زادت الدقة في تحديد حالة معينة قلت في تحديد الحالة الأخرى .

1.6.2 معنى هذا المبدأ :

- إن الإنسان ليس قادراً على معرفة كل شيء بدقة 100% ، ولا يمكنه قياس كل شيء بدقة 100% ، إنما هناك قدر لا يعرفه ولا يستطيع قياسه .
- وصف هايزنبرك " إنه عدم استطاعتنا معرفة المستقبل لا تنبع من عدم معرفتنا الحاضر ، وإنما بسبب عدم استطاعتنا معرفة الحاضر " وبذلك نفى المقولة المشهورة " إنه يمكننا معرفة المستقبل إذا عرفنا الحاضر بدقة " .

1.6.3 أمثلة على مبدأ الشك :

- العالم الذي يدرس النشاط الإشعاعي للذرات ، يمكنه أن يتنبأ فقط بأن من كل ألف مليون ذرة راديوم هناك مليونان فقط سوف تصدر أشعة كما في اليوم التالي . لكنه لا يستطيع معرفة أي ذرة من مجموع ذرات الراديوم سوف تفعل ذلك . ويمكننا القول إنه كلما زادت عدد الذرات كلما قل عدم التأكد وكلما نقص عدد الذرات كلما زاد عدم التأكد .
- لنا أن نسأل أين يكون الإلكترون حول النواة ؟ ولكن لنا فقط أن نتكلم حول احتمال وجوده حول النواة ، ربما يكون عند مسافات مختلفة من النواة في عدة مواضع A° 1, 2, 3 وحتى $100 A^\circ$. من النواة ، هذه الاحتمالات تأخذ قيم محددة .

مثال (١) : درجة حرارة سطح الشمس 5700 K . احسب ذروة قيمة الطول الموجي للإشعاع المنبعث وما مقدار قيمة الطاقة التي تشعها الشمس ؟ إذا علمت ان المسافة الى الأرض حوالي 200 sun radii ، ما هو أقصى طاقة ممكنة من أشعة الشمس التي يشعها كيلومتر مربع واحد منها .

$$\therefore T \lambda_{max} = \frac{1}{5} C_2 \quad , \quad C_2 = 1.44 \text{ cm K}$$

$$C_2 = 1.44 \text{ cm K} = 1.44 \times 10^{-2} \text{ m K}$$

$$\therefore 5700 \text{ K} \times \lambda_{max} = \frac{1}{5} (1.44 \times 10^{-2} \text{ m K})$$

$$\lambda_{max} = \frac{0.00288 \text{ m K}}{5700 \text{ K}} = 5.1 \times 10^{-7} \text{ m}$$

نقوم بحساب مساحة الشمس من العلاقة التالية :

$$A = 4 \pi R^2$$

$$A = 4 (3.14) \times (6.96 \times 10^8)^2 = 6.08 \times 10^{18} \text{ m}^2$$

$$\therefore \varepsilon = \sigma T^4$$

$$\varepsilon = 5.67 \times 10^{-8} \text{ W m K}^{-1} \times (5700 \text{ K})^4$$

$$\varepsilon = 5.98 \times 10^7 \text{ Watts/m}^2$$

هذه القيمة هي لكل متر مربع من سطح الشمس . ولحساب الطاقة الكلية لمساحة الشمس بكاملها :

$$\varepsilon_{Total} = A \varepsilon = 6.08 \times 10^{18} \text{ m}^2 \times 5.98 \times 10^7 \text{ Watts/m}^2$$

$$\varepsilon_{Total} = 3.6 \times 10^{26} \text{ Watts}$$

مثال (٢) : اذا كانت درجة حرارة مساحة جسم الإنسان تقريباً $90^\circ F$. ماهي قيمة الطاقة المنبعثة من هذا الجسم بوحدة $W m^{-2}$ ؟ كذلك احسب ذروة قيمة الطول الموجي للإشعاع المنبعث . وماهي قيمة إجمالي الطاقة المشعة المنبعثة بوحدة الوات ، إذا علمت ان متوسط مساحة سطح الجسم للرجل البالغ من الذكور 1.9 m^2 ويبلغ متوسط مساحة سطح الجسم للمرأة حوالي 1.6 m^2 .

$$\therefore \varepsilon = \sigma T^4 = 5.67 \times 10^{-8} W m K^{-1} \times (305 K)^4 = 491 \text{ Watts}/m^2$$

$$\therefore T \lambda_{max} = \frac{1}{5} C_2 \quad , \quad C_2 = 1.44 \text{ cm K}$$

$$C_2 = 1.44 \text{ cm K} = \frac{1.44}{100} m K = 1.44 \times 10^{-2} m K$$

$$\therefore T \lambda_{max} = \frac{1}{5} C_2 \quad \Rightarrow \quad 305 K \times \lambda_{max} = \frac{1}{5} (1.44 \times 10^{-2} m K)$$

$$\therefore \lambda_{max} = \frac{2.88 \times 10^{-3} m K}{305 K} = 9.5 \times 10^{-6} m = 9.5 \mu m$$

فإن كثافة الطاقة المشعة بوحدة الوات :

$$Energy_{male} = A \varepsilon = 1.9 m^2 \times 491 \text{ Watts}/m^2 = 933 W$$

$$Energy_{female} = A \varepsilon = 1.6 m^2 \times 491 \text{ Watts}/m^2 = 786 W$$

مثال (٣) : جسم أسود يشع عند درجة حرارة $5 \times 10^4 K$ ، ماهي مساحة السطح المشع المطلوبة بحيث تكون قدرة الإشعاع مساوية الى $4 \times 10^{12} W$.

$$\therefore \varepsilon = \sigma . T^4 = \frac{P}{A} \quad \Rightarrow \quad \therefore A = \frac{P}{\sigma . T^4} \quad \text{الحل :}$$

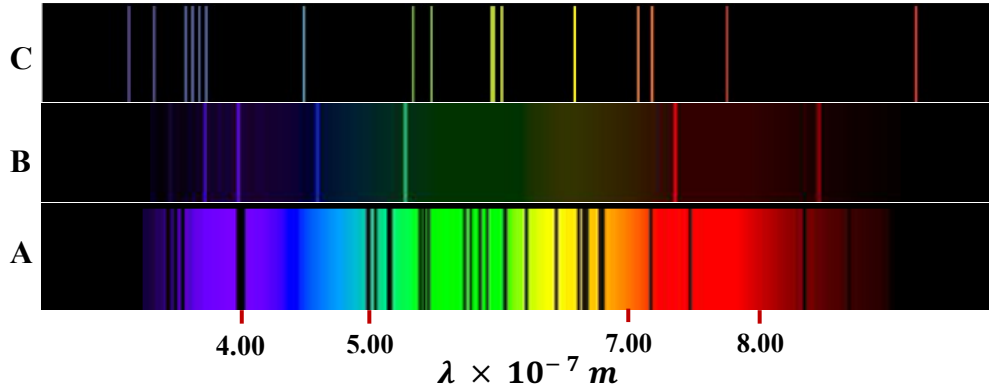
$$\therefore A = \frac{P}{\sigma . T^4} = \frac{4 \times 10^{12} W}{(5.67 \times 10^{-8} W/m^2 K^4) (5 \times 10^4 K)^4} = 11.286 \approx 11.3 Wm^2$$

اذن لكي تكون قدرة الإشعاع مساوية الى $4 \times 10^{12} W$ فإننا نحتاج أن تكون مساحة السطح مساوية الى $11.3 Wm^2$.

مثال (٤) : الشكل A يمثل طيف ينتج عن بخار ذرات الزئبق . أجب عما يلي :

(أ) أي الشكلين B أم C ينتج أيضاً عن ذرات الزئبق ؟

(ب) إذا سقط إشعاع طاقة كل فوتون من فوتوناته $3.97 \times 10^{-19} J$ على ذرات بخار الزئبق مستقر ، فهل يمكن أن تثار الذرات ؟



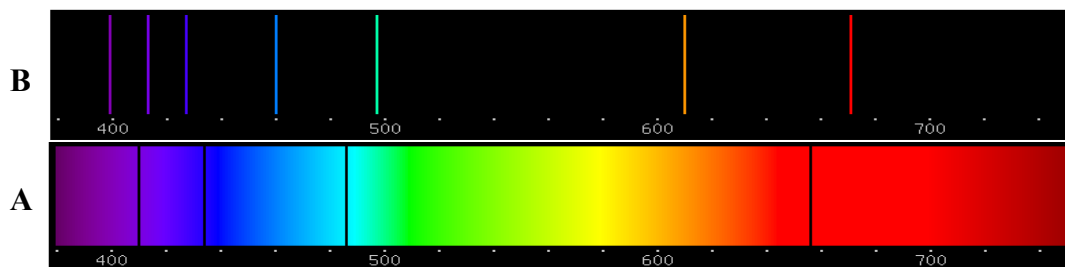
(أ) ليس أي من الخطتين ينتج من الزئبق . لأن بعض الخطوط الظاهرة في طيف الإمتصاص A لا تظهر في أي من الشريطين .

(ب) نحسب الطول الموجي للفوتونات الساقطة ونقارنها مع الأطوال الموجية الظاهرة على الشريط .

$$\therefore E = h \nu = \frac{h C}{\lambda} = \frac{6.63 \times 10^{-34} J s \times 3 \times 10^8 m s^{-1}}{3.97 \times 10^{-19} m} = 5.0 \times 10^{-7} m$$

تثار ذرات الزئبق لأن طول موجة الفوتونات الساقطة تساوي الطول الموجي للخط الأخضر في طيف الإمتصاص .

مثال (٥) : يظهر الشكل التالي الطيفين A و B ، إدرس الشكل ثم أجب عما يلي :



أ) هل الطيفين ناتجين عن العنصر نفسه ؟

ب) على اعتبار إن طاقة مستوى الاستقرار للمادة التي ينتج عنها الطيف A تساوي صفر ، فاحسب الطاقة اللازمة للحصول على الخط الطيفي ذو الطول الموجي 485 nm .

الحل : إن خطوط طيف الإمتصاص A لا يتطابق مع خط طيف الانبعاث في الشريط B ، لذلك فهما لذرات عنصرين مختلفين .

$$\because E_0 = 0 , E_n = h \nu \Rightarrow E_n = \frac{h C}{\lambda} = \frac{6.65 \times 10^{-34} \text{ J s} \times 3 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}}{485 \times 10^{-9} \text{ m}}$$

$$\therefore E_n = 41.1 \times 10^{-14} \text{ J}$$

مثال (٦) : احسب عدد الفوتونات المنبعثة من مصدر ضوئي أصفر اللون قدرته 100 W في الثانية الواحدة على فرض ان الضوء المنبعث هو أحادي الموجة بطول مقداره 560 nm .

الحل : الطاقة الكلية المنبعثة من المصدر الضوئي في الثانية الواحدة هي :

$$E_{total}/s = 100 \text{ J/s}$$

طاقة الفوتون الواحد :

$$E_{photon} = h \nu = \frac{h c}{\lambda} = \frac{(6.636 \times 10^{-34} \text{ J s}) (3 \times 10^8 \text{ m s}^{-1})}{560 \times 10^{-9} \text{ m}} = 3.7 \times 10^{-19} \text{ J}$$

فأذن عدد الفوتونات المنبعثة في الثانية الواحدة :

$$n = \frac{E_{total}/s}{E_{photon}} = \frac{100 J s^{-1}}{5.839 \times 10^{-28} J/Photon} = 2.7 \times 10^{20} Photon/s$$

مثال (٧) : أضيء سطح الصوديوم بضوء طول موجته $3000 \text{ \AA}$ ، فإذا علمت ان دالة الشغل لمعدن الصوديوم تساوي 2.46 eV . احسب ما يلي :

أ – الطاقة الحركية للإلكترونات المتحررة .

ب – سرعتها

ج – الطول الموجي الحرج .

$$\text{الحل :} \quad \because 1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m} , \quad 1 \text{ eV} = 1.6023 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$\therefore \lambda = 3000 \text{ \AA} = \frac{3000}{10^{10}} = 3 \times 10^{-7} \text{ m}$$

$$1 \text{ J} = 1 \text{ N.m} = 1 \frac{\text{Kg.m}^2}{\text{s}^2}$$

$$\therefore \phi = 2.46 \text{ eV} = 2.46 \times 1.6023 \times 10^{-19} = 3.941 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$\because E = h\nu = \phi + K_E \Rightarrow h \times \frac{C}{\lambda} = \phi + K_E$$

$$6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s} \times \frac{3 \times 10^8 \text{ m/s}}{3 \times 10^{-7} \text{ m}} = 3.941 \times 10^{-19} \text{ J} + K_E$$

$$6.626 \times 10^{-19} \text{ J} = 3.941 \times 10^{-19} \text{ J} + K_E \Rightarrow \therefore K_E = 2.685 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$\because K_E = \frac{1}{2} m V^2 \Rightarrow \therefore 2.685 \times 10^{-19} \text{ J} \left(\frac{\text{Kg.m}^2}{\text{s}^2} \right) = \frac{1}{2} \times 9.109 \times 10^{-31} \text{ Kg} \times V^2$$

$$\because K_E = \frac{1}{2} m V^2 \Rightarrow \therefore 2.685 \times 10^{-19} \text{ J} \left(\frac{\text{Kg.m}^2}{\text{s}^2} \right) = \frac{1}{2} \times 9.109 \times 10^{-31} \text{ Kg} \times V^2$$

$$V^2 = 58.9 \times 10^{10} \frac{\text{m}^2}{\text{s}^2} \Rightarrow \therefore V = 7.67 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

$$\because \phi = h\nu_o = h \times \frac{C}{\lambda_o} \Rightarrow \therefore 3.941 \times 10^{-19} \text{ J} = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s} \times \frac{3 \times 10^8 \text{ m/s}}{\lambda_o}$$

$$\lambda_o = 5 \times 10^{-7} \text{ m}$$

مثال (٨) : إذا علمت إن الطاقة اللازمة لنزع الكترون من سطح معدن هي 3.54 eV ، واسقط على السطح ضوء وحيد اللون طول موجته 4000 Å ، هل تنبعث الإلكترونات من سطح المعدن .

$$\text{الحل :} \quad \because 1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m} , \quad 1 \text{ eV} = 1.6023 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$\because \phi = 3.54 \text{ eV} = 3.54 \times 1.6023 \times 10^{-19} = 5.672 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$\because \lambda = 4000 \text{ Å} = \frac{4000}{10^{10}} = 4 \times 10^{-7} \text{ m} , \because C = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$$

$$\because E = h \nu = h \times \frac{C}{\lambda} = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s} \times \frac{3 \times 10^8 \text{ m/s}}{4 \times 10^{-7} \text{ m}} = 4.97 \times 10^{-19} \text{ J}$$

بما ان $h \nu < \phi$ ، أي ان الفوتون له طاقة غير كافية في السماح للإلكترون في مغادرة المعدن ومن ثم لا يحدث التأثير الكهروضوئي . بمعنى آخر سوف تكون الطاقة الحركية للإلكترون مساوية للصفر .

مثال (٩) : تبلغ قيمة ϕ لفلز البلاتين $8 \times 10^{-19} \text{ J}$ ، هل يستطيع فوتون ذو طول موجي 200 nm أن يسبب تأثير كهروضوئي ؟ إذا كان كذلك ، احسب الطاقة الحركية للإلكترون المنبعث .

$$\text{الحل :} \quad \because 1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m} , \because \lambda = 200 \text{ nm} = \frac{200}{10^9} = 2 \times 10^{-7} \text{ m} , \because C = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$$

$$\because E = h \nu = h \times \frac{C}{\lambda} = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s} \times \frac{3 \times 10^8 \text{ m/s}}{2 \times 10^{-7} \text{ m}} = 9.939 \times 10^{-19} \text{ J}$$

بما ان $h \nu > \phi$ ، أي ان الفوتون له طاقة كافية في السماح للإلكترون في مغادرة المعدن ومن ثم سوف يحدث التأثير الكهروضوئي . بمعنى آخر سوف يمتلك الالكتران كمية من الطاقة الحركية للإلكترون .

$$\because E = h \nu = \phi + K_E \Rightarrow 9.939 \times 10^{-19} \text{ J} = 8 \times 10^{-19} \text{ J} + K_E$$

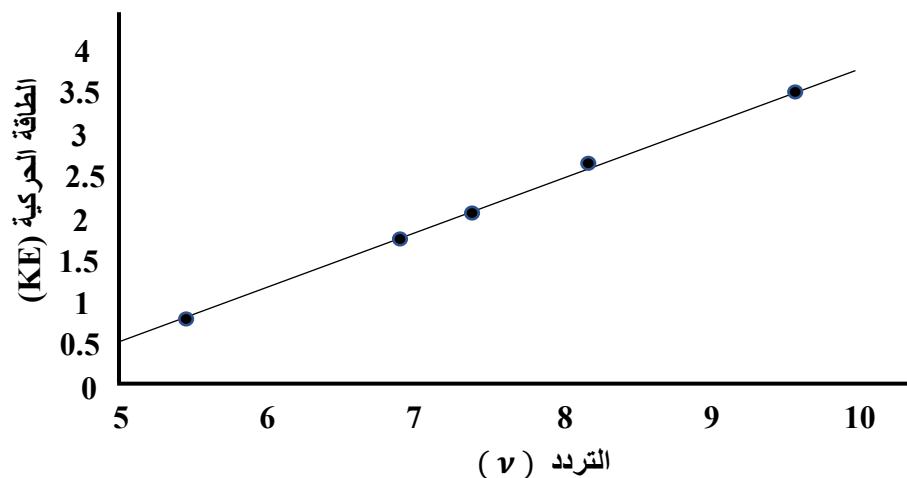
$$\therefore K_E = 1.939 \times 10^{-19} \text{ J}$$

مثال (١٠) : فيما يلي النتائج التي حصل عليها ميليكان عند دراسة ظاهرة التأثير الكهروضوئي . ما هو مقدار طاقة العتبة ، ثم احسب قيمة ثابت بلانك .

الطاقة الحركية للإلكترون $J \times 10^{19}$	التردد $\nu (s^{-1}) \times 10^{-14}$
3.41	9.58
2.56	8.21
1.95	7.40
1.64	6.91
0.74	5.49

الحل :
$$\therefore E = h \nu = \phi + K_E = h\nu_o + \frac{1}{2} m V^2$$

(حيث K_E هي الطاقة الحركية وإن $\phi = h\nu_o$) وعند الرسم بيانياً بين الطاقة الحركية K_E مقابل التردد ν سنحصل على الشكل التالي :



$$Slope = \text{الميل} = h = \frac{(2.56 - 0.74) \times 10^{19} J}{(8.21 - 5.49) \times 10^{-14} s^{-1}} = 6.65 \times 10^{-34} J s$$

$$\Phi = \text{القطع الموجب} = 0.5 \times 10^{19} J$$

$$\because \Phi = h \nu_o \Rightarrow \nu_o = \frac{\Phi}{h} = \frac{0.5 \times 10^{19} J}{6.65 \times 10^{-34} J s} = 7.5 \times 10^{12} s^{-1}$$

مثال (١١) : إذا كان موقع دقيقة من الغبار كتلتها $1 \mu g$ معلوما ضمن $10^{-3} mm$ والكثرون محدد لمنطقة بحجم الذرة ($1 \times 10^{-10} m$) قارن بين نتيجتي تطبيق مبدأ اللادقة لهايزنبرك على هاذين الجسمين .

$$\Delta P_x \cdot \Delta X \geq \frac{h}{4\pi} \quad \text{الحل : مبدأ اللادقة لهايزنبرك :}$$

بالنسبة لدقيقة الغبار تكون اللادقة P_x في كالاتي :

$$\Delta P_x \approx \frac{h/4\pi}{\Delta X} = \frac{6.626 \times 10^{-34} J s / 4 \times 3.14}{10^{-3} \times 10^{-3} m}$$

$$\Delta P_x = 5.27 \times 10^{-29} \frac{J s}{m} (Kg m s^{-1})$$

أما اللادقة في السرعة (نرمز لها ΔV_x) تساوي :

$$\Delta V_x \approx \frac{\Delta P_x}{m} = \frac{5.27 \times 10^{-29} Kg m s^{-1}}{1 \times 10^{-6} \times 10^{-3} Kg} = 5.27 \times 10^{-20} m s^{-1}$$

وهي على العموم صغيرة جداً وغير ممكنة القياس بواسطة أجهزة المختبر . أما بالنسبة للإلكترون فتكتب اللادقة في P_x كالاتي :

$$\Delta P_x \approx \frac{h/4\pi}{\Delta X} = \frac{6.626 \times 10^{-34} J s / 4 \times 3.14}{1 \times 10^{-10} m} = 5.27 \times 10^{-24} Kg m s^{-1}$$

وبما ان كتلة الإلكترون تساوي $9.109 \times 10^{-31} Kg$ لذا فان اللادقة في سرعته تعطى كالاتي :

$$\Delta V_x \approx \frac{\Delta P_x}{m} = \frac{5.27 \times 10^{-24} Kg m s^{-1}}{9.109 \times 10^{-31} Kg} = 5.78 \times 10^6 m s^{-1}$$

وهي عالية جداً بالمقارنة مع تلك العائدة لدقيقة الغبار .

مثال (١٢) : الكترون مقيد بحجم ذرة المغنسيوم التي يبلغ نصف قطرها 150 pm . احسب أقل قيمة للادقة في سرعته ؟

الحل : أقل قيمة للادقة تعني :

$$\therefore \Delta P \cdot \Delta X = \frac{h}{4\pi} \Rightarrow \Delta P \times 150 \times 10^{-12} m = \frac{6.626 \times 10^{-34} J s}{4 \times 3.14}$$

$$\therefore \Delta P = 35.17 \times 10^{-26} Kg m s^{-1}$$

$$\therefore P = m V \Rightarrow \Delta P = m \Delta V$$

$$35.17 \times 10^{-26} Kg m s^{-1} = 9.109 \times 10^{-31} Kg \times \Delta V$$

$$\therefore \Delta V = 3.86 \times 10^5 m/s$$

مثال (١٣) : قيس انطلاق الكترون فوجد انه يساوي $6 \times 10^3 m/s$. فإذا كان الخطأ في إنطلاقه يساوي 0.003 % من انطلاقه الأصلي . احسب أقل لادقه في موضع هذا الإلكترون .

$$\therefore \Delta V = \frac{0.003}{100} V \quad \text{الحل :}$$

$$\Delta P = m \Delta V = 9.109 \times 10^{-31} Kg \times \frac{0.003}{100} \times 6 \times 10^3$$

$$\therefore \Delta P = 1.64 \times 10^{-31} Kg m s^{-1}$$

$$\therefore \Delta P \cdot \Delta X = \frac{h}{4\pi} \Rightarrow 1.64 \times 10^{-31} Kg m s^{-1} \times \Delta X = \frac{6.626 \times 10^{-34} J s}{4 \times 3.14}$$

$$\therefore \Delta X = 3.86 \times 10^{-5} m$$

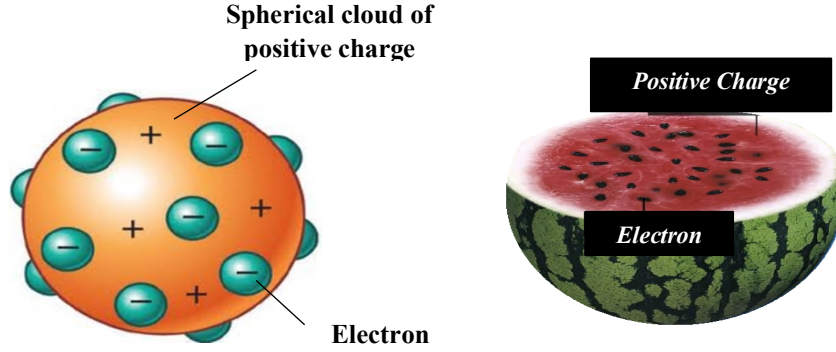
النماذج الذرية

مر وصف الذرة بنماذج متنوعة عبر فترات مختلفة ومنها نموذج ثومسون ، نموذج رذرفورد ، نموذج بور لذرة الهيدروجين ، نموذج بور - سومرفيلد ، نموذج دي برولي .

نموذج ثومسون Thomson's Atomic Model

في عام 1904 توصل العالم ثومسون الى النتائج التالية على غاز الهيدروجين :

- ١ - الذرة متعادلة كهربائيا .
 - ٢ - الأيونات الموجبة لها تقريبا نفس كتلة الذرة .
 - ٣ - الإلكترونات السالبة أخف بكثير من الأيونات الموجبة .
- نص الفرضية : الذرة شبيهة بكرة مصمتة تتوزع بداخلها الشحنات الموجبة بانتظام وتتخللها الإلكترونات السالبة بحيث يكون مجموعها مساويا للشحنة الموجبة . (الكرة المصمتة تعني كرة مصقولة ناعمة مرنة) . وسمي هذا النموذج بنموذج فطيرة البرقوق أو البطيخة حيث المادة الحمراء فيها هي الشحنة الموجبة والبذور السوداء التي تتخللها هي الإلكترونات (الشكل 1 . 2) .



شكل 1 . 2 : نموذج ثومسون للذرة . اعتقد ثومسون ان الذرة تتكون من شكل كروي موجبة الشحنة تتوزع الإلكترونات على سطحها كجسيمات سالبة الشحنة . وقد عرف هذا النموذج من الذرة باسم نموذج فطيرة الخوخ أو فطيرة الزبيب .

مميزات نموذج ثومسون :

هذا النموذج صور الذرة علي انها عبارة عن كرة صغيرة مصقولة مرنة وهذه الميزة مكنت العلماء من تفسير النظرية الحركية للغازات .

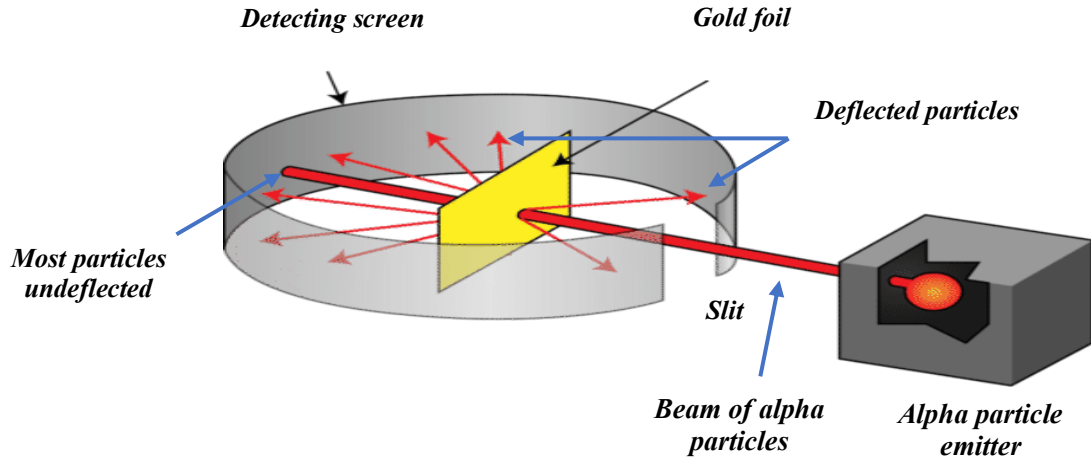
عيوب هذا النموذج

- لم يستطع تفسير سبب تشتت جسيمات ألفا الموجبة الساقطة على صفيحة الذهب .
- لم يستطع تفسير الخط الطيفي لسلسلة بالمر لذرة الهيدروجين .

نموذج رذرفورد Rutherford's Atomic Model

في عام 1909 ، أجرى رذرفورد تجربة لاختبار صلاحية نموذج ثومسون (الشكل 2 . 2) وكانت التجربة مكونة من :

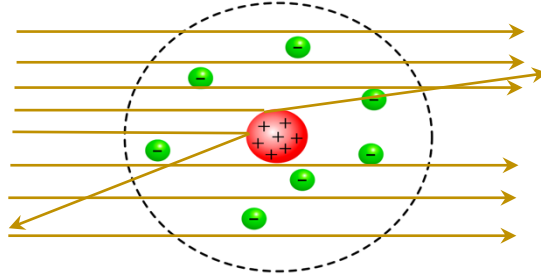
- مصدر مشع كعنصر الراديوم لتوليد جسيمات ألفا (α) ذات الشحنة الموجبة ، موضوع داخل قالب من الرصاص وذلك لان كثافة الرصاص عالية ويمنع نفاذ الأشعة النووية من خلاله للحفاظ علي حياة العاملين .
- صفيحة من الذهب .
- شاشة اسطوانية مصنوعة من مادة فلورسيه مطلية من الداخل بكبريتيد الخارصين والتي تحدث وميض عند سقوط أشعة ألفا (α) عليها .



شكل 2 . 2 : يوضح تجربة رذرفورد على صفيحة رقيقة جداً من الذهب ، حيث تم توجيه عنصر مشع تنبعث منه جسيمات ألفا نحو ورقة رقيقة من رقائق الذهب التي كانت محاطة بشاشة تتيح الكشف عن الجسيمات المنحرفة .

1. 2. 2 تفسير رذرفورد لانحراف جسيمات ألفا (α)

- ١ - ان معظم الذرة فراغ
 - ٢ - كتلة الذرة وشحنتها الموجبة متركزة داخل حيز صغير سماه النواة لذلك فان جسيمات ألفا الموجبة عندما تمر بالقرب من النواة الموجبة فأنها تتنافر مع النواة وتنحرف يمينا ويسارا .
 - ٣ - الإلكترونات ذات الشحنة السالبة تتوزع حول النواة في مدارات شبيهة بمدارات الكواكب السيارة في النظام الشمسي .
 - ٤ - الشحنة السالبة للإلكترونات تساوي الشحنة الموجبة للنواة أي ان الذرة متعادلة كهربائيا .
- " وأصبح هذا النموذج يعرف بالنظام النووي لكونه أول نموذج يقول ان الذرة تحتوي على نواة " ، (الشكل 3 . 2) .



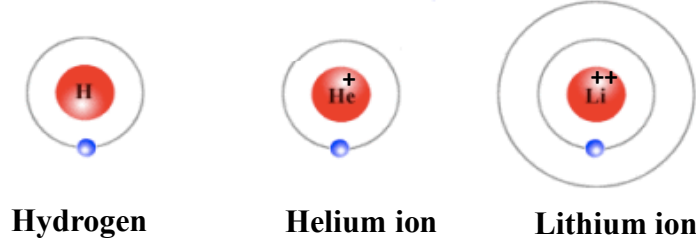
شكل 3 . 2 : نموذج رذرفورد للذرة . يلاحظ ان نسبة قليلة من جسيمات ألفا قد انحرفت بزوايا كبيرة ، وهو ما يمكن تفسيره ان النواة الموجبة الشحنة موجودة في مركز الذرة .

عيوب نظرية رذرفورد التي قدمها علماء الفيزياء الكلاسيكية

- وفقا لنموذج رذرفورد لا يمكن أن تكون ذرة الهيدروجين مستقرة ، وهذا خلاف الواقع اذ ان ذرة الهيدروجين مستقرة وتبعث بطيف خطي . إذ تعارض هذا النموذج بوضوح مع نظرية ماكسويل والتي نصت (إذا تحرك جسيم مشحون بشحنة كهربائية في مدار دائري يفقد جزء من طاقته تدريجيا باعثة بإشعاعات فيقل نصف قطر المدار تبعا لنقص طاقته) .
- وبتطبيق نظرية ماكسويل على حركة الإلكترون في ذرة رذرفورد فان الإلكترون يكون في حالة إشعاع مستمر ويقل نصف قطره وقل سرعته تدريجيا ويبدأ يدور في مدار حلزوني حتى يسقط في النواة وينتهي النظام .
- كذلك فان هذا النموذج لم يستطع إيجاد تفسير لسلسلة بالمر لذرة الهيدروجين .

نموذج بور Bohr's Atomic Model

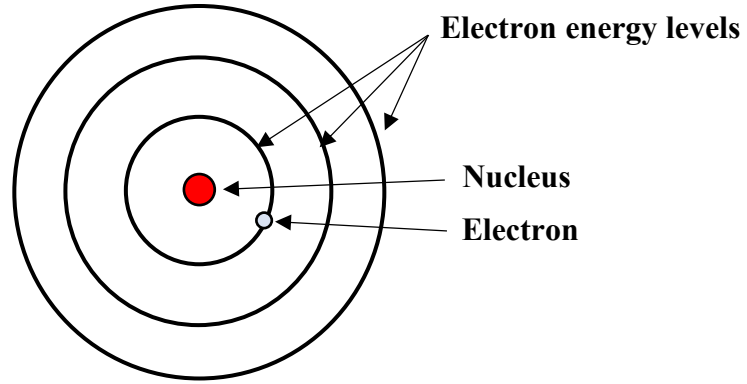
العالم نيلز بور استفاد من مبدأ تكميم الطاقة في وضع نموذجة لذرة الهيدروجين . في عام 1913 ، أعلن العالم بور عن نظريته لذرة الهيدروجين والأيونات الشبيهة بها التي لها الكترون واحد مثل ذرة الهيليوم أحادية التآين أو ذرة الليثيوم ثنائية التآين وكما موضح في (الشكل 2 . 4) .



شكل 2 . 4 : النماذج التي تصور مستويات طاقة الإلكترون في ذرة الهيدروجين وأيون الهيليوم والليثيوم طبقاً لتصوير العالم بور .

فروض نظرية بور

١ – يستطيع الإلكترون في ذرة الهيدروجين ان يدور حول النواة في مدارات دائرية دون أن تشع الذرة طاقة وهذه المدارات سميت بمستويات الطاقة المستقرة المكتمة (الشكل 2 . 5) .

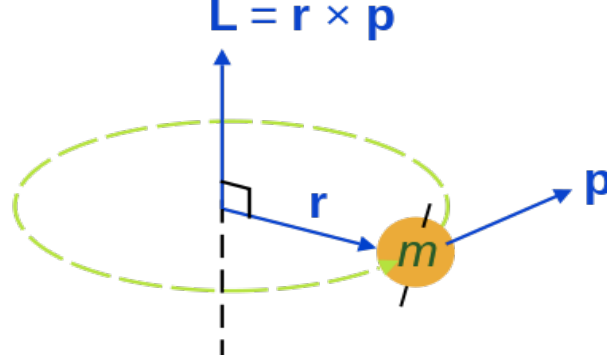


شكل 2 . 5 : يوضح مقترح العالم بور بأن الإلكترون مقيد في مدار مكتم ذو طاقة معينة سمي بمستوى الطاقة المستقرة المكتمة ويدور في مدار دائري حول النواة .

٢ – هذه المدارات المستقرة المكتمة هي تلك التي تكون كمية التحرك الزاوي للإلكترون فيها عبارة عن :

$$L = m \times V \times r = n \times \frac{h}{2\pi} = n \hbar$$

ويوضح (الشكل 6 . 2) إتجاه متجه الزخم الزاوي المداري للإلكترون وكذلك إتجاه متجه كمية التحرك الخطي للجسيم .



شكل 6 . 2 : يبين تولد الزخم الزاوي المداري للإلكترون وكذلك اتجاه متجه كمية التحرك الخطي للجسيم عند دوران الإلكترون في مسار دائري .

n : عدد صحيح يعبر عن رقم المدار ويأخذ القيم 1 ، 2 ، 3 . m يمثل كتلة الإلكترون .

V تمثل سرعة الإلكترون في المدار رقم n .

r يمثل نصف قطر المدار رقم n ، L يمثل الزخم الزاوي المداري للإلكترون .

P يمثل كمية التحرك الخطي للجسيم .

٣ - تأكيد للفرضية رقم ١

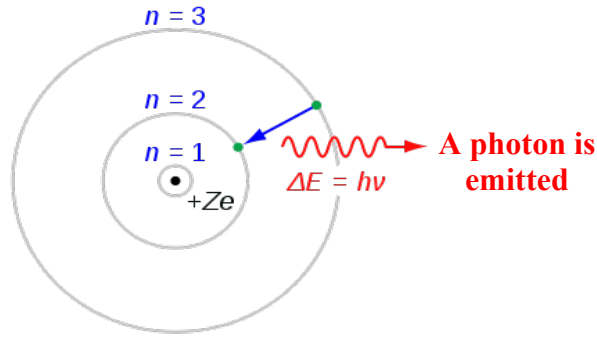
لا تشع الذرة طاقة طالما بقى الإلكترون في مداره (في مستوى طاقته) ولكنها تشع كمية محددة من الطاقة اذا انتقل الإلكترون من مستوى طاقة أدنى الى مستوى طاقة أعلى بحيث تكون كمية الطاقة التي تمتصها أو تشعها الذرة تساوي الفرق بين طاقة المستويين :

$$\Delta E = E_2 - E_1$$

E_1 يمثل طاقة المستوى الابتدائي الذي انتقل منه الإلكترون .

E_2 طاقة المستوى النهائي الذي انتقل اليه الإلكترون .

طبقا للفرضية الذرة تشع كمية مكتمة من الطاقة وكذلك تمتص الذرة كمية مكتمة من الطاقة للانتقال (الشكل 2.7) .



شكل 2.7 : يوضح ان الإلكترون عندما يقفز بين المدارات يكون مصحوباً بكمية منبعثة أو ممتصة من الطاقة الكهرومغناطيسية $h\nu$.

مبررات نظرية العالم بور

١ – مبرر الفرضية الأولى

جاء منطقياً من الواقع حيث ان ذرة الهيدروجين ، ذرة مستقرة لا تبعث إشعاع طالما لم تثار بأي طاقة خارجية .

٢ – مبرر الفرضية الثانية

أتى في زمن لاحق عندما اكتشفت الطبيعة الموجية للإلكترون عام 1926 على يد المهندس الفرنسي دي برولي .

٣ – مبرر الفرضية الثالثة

أتى من فرضية التكميم لبلانك وهي تعبر أيضاً عن مبدأ حفظ الطاقة .

مميزات نظرية بور

١ – أعطت نظرية بور تفسيراً مرضياً لسلسلة بالمر وتنبأت باكتشاف سلاسل طيفية أخرى .

٢ – أعطت نظريته جواباً للسؤال الذي كان يطرح نفسه لماذا الطول الموجي يعطى بالفرق بين حدين في سلسلة بالمر .

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

٣ – استطاعت نظرية بور من اعتبارات نظرية بحتة ان تحسب نصف قطر المدار للإلكترون وسرعته وترددته وطاقته بالإضافة الى قيمة ثابت ريديرك .

اعتبرت نظرية بور خليطاً من الفيزياء التقليدية وفكرة تكميم الطاقة لبلانك ولذلك سميت نظريته بنظرية الكم القديمة أو بالنظرية الشبه تقليدية .

عيوب نظرية بور

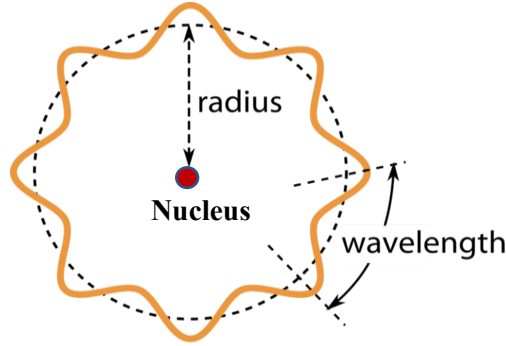
- ١ – لم تفسر طيف ذرة أخرى غير الهيدروجين .
- ٢ – اعتبر الإلكترون جسيم مادي سالب الشحنة دون خواص موجية .
- ٣ – إمكانية تعيين مكان وسرعة الإلكترون عملياً معاً بدقة رغم استحالة ذلك عملياً .
- ٤ – اعتبر الذرة مسطحة أي تدور بصورة دائرية وأهمل باقي الاتجاهات في الفراغ والحقيقة ان لها اتجاهات فراغية x, y, z .

نموذج العالم لويس دي برولي Lois Victor de Broglie

وصل دي برولي في عام ١٩٢٤ الى إفتراض ازدواجية (ثنائية) موجة – جسيم Wave – Particle duality اعتماداً على أعمال أينشتاين المتعلقة بتفسير ظاهرة التأثير الكهروضوئي وأعمال ماكس بلانك لدراسة إشعاع الجسم الأسود . وقد تبين ان هذا الافتراض ينطبق أيضا على جميع الجسيمات التي هي في حجم الذرة ومادونها مثل البروتون والنيوترون وغيرها .

(بما ان للفوتونات خواص موجية وجسيمية ، فمن المحتمل ان يكون لأشكال المادة جميعها خواص موجية كما لها خواص خواص جسيمية) .

أي ان الأجسام جميعها يصاحبها موجات في أثناء حركتها تسمى موجات المادة أو موجات دي برولي. (الشكل 10 . 2) وهي ليست موجات كهرومغناطيسية كموجات الضوء ولا موجات ميكانيكية كموجات الصوت ، إنما لها خواص ترتبط بخواص الجسم الذي تلازمه . أي ان الأجسام المادية لها طبيعة مزدوجة (جسيمية – موجية) .



شكل 10 . 2 : يوضح تخيل العالم دي برولي ان مدارات الإلكترون تكون بصورة موجات دائمة لبعض مدارات الإلكترون حول البروتون .

صاغ دي برولي علاقة تربط بين كتلة الجسيم الأولي وطول الموجه المقترنة به من :

أ- فرضية بور : كمية الحركة الزاوية المدارية للإلكترون حول النواة تساوي عدداً صحيحاً من ثابت بلانك أي :

$$L = r . p = n \hbar = \frac{n h}{2 \pi}$$

$$2 \pi r = \frac{n h}{p} \quad \dots \dots \dots 1$$

ب- من شرط بور – سمرفيلد : مسار الإلكترون حول النواة يكون مستقراً إذا كان يساوي عدداً صحيحاً من طول الموجة أي :

$$2 \pi r = n \lambda \quad \dots \dots \dots 2$$

بتعويض معادلة رقم 1 في معادلة رقم 2 نحصل على :

$$\frac{n h}{p} = n \lambda$$

$$\therefore \lambda = \frac{h}{P} = \frac{h}{m V}$$

P يمثل الزخم الخطي linear momentum ، أي ان طول الموجة المقترنة بالجسيم تقصر بزيادة سرعته ، كما تقصر بزيادة كتلته . كذلك بإمكاننا إيجاد العلاقة بين طاقة الجسيم وزخمه الخطي :

$$\therefore v = \frac{c}{\lambda} \quad \Rightarrow \quad \therefore E = h v \quad \Rightarrow \quad \therefore E = h \times \frac{c}{\lambda}$$

$$\therefore \lambda = \frac{h}{P} \quad \Rightarrow \quad \therefore E = h \times \frac{c}{\frac{h}{P}} \quad \Rightarrow \quad \therefore E = c \times P \quad \Rightarrow \quad \therefore P = \frac{E}{c}$$

العلاقات التي تم اشتقاقها من الحسابات النظرية التي توصل لها بور

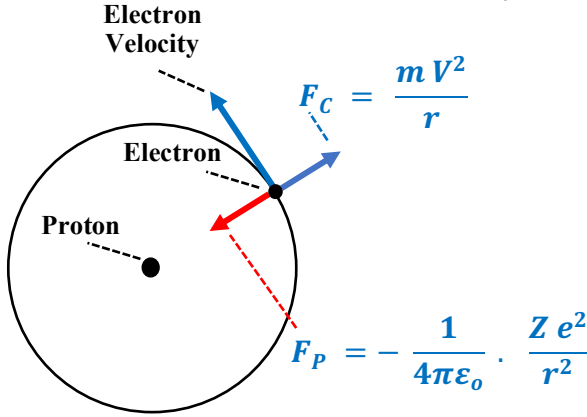
نفترض ذرة تحتوي على نواة بشحنة Ze وكتلة M والكترون شحنته e وكتلته m (نفترض ان كتلة الإلكترون مهملة بالنسبة لكتلة النواة وعليه نفرض ان النواة ثابتة في الفراغ) . من قانون الحفاظ على بقاء الإلكترون في مداره فإنه يقع تحت تأثير قوتين متساويتين في المقدار ومتعاكستين في الاتجاه (قوة كولوم وقوة الطرد المركزي) .

$$\therefore F_C = F_P \quad \dots\dots\dots 1$$

$$\therefore F_C + F_P = 0 \quad \dots\dots\dots 2$$

$$\therefore F_P = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Z e^2}{r^2} \quad \dots\dots\dots 3$$

$$\therefore F_C = m a_C = m \frac{V}{t} \quad \dots\dots\dots 4$$



F_C تمثل قوة الطرد المركزي التي تنشأ بسبب تسارع الجاذبية عند التحرك في مسار دائري .

F_P تمثل القوة الناتجة بسبب الجذب الكهربائي (قوى كولوم) الناتج بين الإلكترون السالب والنواة الموجبة الشحنة عند دوران الإلكترون حول النواة في مسار دائري .

Centripetal Force (F_C) = Electrostatic Force (F_P)

$$\frac{m V^2}{r} = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Z e^2}{r^2}$$

$$\therefore V = \frac{r}{t} \quad \Rightarrow \quad t = \frac{r}{V} \quad \dots\dots\dots 5$$

بتعويض علاقة 5 في علاقة 4 نحصل :

$$F_C = m \frac{V}{r/V} = V \frac{V}{r} m$$

$$\therefore F_C = \frac{m V^2}{r} \quad \dots\dots\dots 6$$

بتعويض علاقة 6 وعلاقة 3 في معادلة 1 نحصل على :

$$\therefore \frac{m V^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Z e^2}{r^2}$$

$$\therefore m V^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Z e^2}{r} \quad \dots\dots\dots 7$$

$$Z e^2 = 4\pi\epsilon_0 m V^2 r \quad \dots\dots\dots 8$$

$$\therefore L = m \times V \times r = n \times \frac{h}{2\pi} = n \hbar$$

$$V = \frac{n \hbar}{m r} \quad \dots\dots\dots 9$$

بتعويض معادلة 9 في معادلة 8 نحصل على :

$$Z e^2 = 4\pi\epsilon_0 m r \left(\frac{n \hbar}{m r} \right)^2 = 4\pi\epsilon_0 \frac{n^2 \hbar^2}{m r} \quad \dots\dots\dots 10$$

بإعادة ترتيب معادلة رقم 10 يمكننا الحصول على علاقة لحساب نصف قطر المدار في ذرة الهيدروجين :

$$r = 4\pi\epsilon_0 \frac{n^2 \hbar^2}{m Z e^2} \quad \dots\dots\dots 11$$

بالتعويض في المعادلة رقم 11 عن $n = 1$ يمكن حساب قيمة نصف القطر للمدار الأول للإلكترون حول النواة لذرة الهيدروجين حيث $Z = 1$ فان نصف القطر يساوي :

$$r_1 = 5.29 \times 10^{-11} m = 0.529 A^{\circ}$$

$$r_n = n^2 r_1 \quad \dots\dots\dots 12$$

$$r_1 = r_1 , \quad r_2 = 4 r_1 , \quad r_3 = 9 r_1 , \quad r_4 = 16 r_1$$

بتعويض معادلة 11 في معادلة 9 يمكننا حساب سرعة الإلكترون في المدار :

$$V = \frac{n \hbar}{m r} = \frac{n \hbar}{m \cdot 4\pi\epsilon_0 \frac{n^2 \hbar^2}{m Z e^2}}$$

$$V = \frac{n \hbar}{m r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z e^2}{n \hbar} \dots\dots\dots 13$$

بالتعويض في المعادلة 13 يمكن حساب سرعة الإلكترون حول النواة في المدار الأول $n = 1$ لذرة الهيدروجين وبالتعويض عن الثوابت في المعادلة نجد ان سرعة الإلكترون تساوي :

$$V = 2.2 \times 10^6 \text{ m/s}$$

$$E_T = E_K + E_P \dots\dots\dots 14$$

$$\therefore E_K = \frac{1}{2} m V^2 \dots\dots\dots 15$$

$$\therefore E_P = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Z e^2}{r} \dots\dots\dots 16$$

بتعويض معادلة 7 في معادلة 15 نحصل على :

$$E_K = \frac{1}{2} m V^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Z e^2}{2 r} \dots\dots\dots 17$$

بتعويض معادلة 16 و معادلة 17 في معادلة 14 نحصل على :

$$E_T = E_K + E_P = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Z e^2}{2 r} + \left(- \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Z e^2}{r} \right)$$

$$E_T = E_K + E_P = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Z e^2}{r} \left(\frac{1}{2} - 1 \right) = - \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Z e^2}{r}$$

$$E_T = E_K + E_P = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Z e^2}{2 r} \dots\dots\dots 18$$

بتعويض معادلة 11 في معادلة 18 نحصل على :

$$E_T = E_K + E_P = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Z e^2}{2 \times 4\pi\epsilon_0 \frac{n^2 \hbar^2}{m Z e^2}}$$

$$E_n = - \frac{m Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2 \hbar^2 n^2} \dots\dots\dots 19$$

بالتعويض عن قيمة الثوابت للمدار الأول $n = 1$ في المعادلة رقم 19 نحصل على :

$$E_{n=1} = - \frac{m Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2 \hbar^2 n^2}$$

$$E_{n=1} = \frac{(9.1 \times 10^{-31} \text{ Kg})(9 \times 10^9 \text{ N m}^2/\text{C}^2)^2(1.6 \times 10^{-19} \text{ C})^4}{2 \times (1.05 \times 10^{-34} \text{ J. sec})^2}$$

$$E_{n=1} = -2.17 \times 10^{-18} \text{ J} = -13.6 \text{ eV}$$

وهذه هي قيمة الطاقة للمستوي الأول وهي طاقة ربط الإلكترون بالنواة والتي تسمى طاقة التأصير Binding energy . أما طاقة المستويات الأخرى فيمكن حسابها استناداً الى قيمة الطاقة في المستوى الأول من العلاقة التالية :

$$E_n = - \frac{13.6}{n^2} \text{ eV} \quad \dots \dots \dots 20$$

$$E_{n=1} = - \frac{13.6}{(1)^2} \text{ eV} = 13.6 \text{ eV} , \quad E_{n=2} = - \frac{13.6}{(2)^2} \text{ eV} = -3.39 \text{ eV}$$

$$E_{n=3} = - \frac{13.6}{(3)^2} \text{ eV} = -1.51 \text{ eV} , \quad E_{n=4} = - \frac{13.6}{(4)^2} \text{ eV} = -0.85 \text{ eV}$$

$$\Delta E = E_{n_H} - E_{n_L} = - \frac{m Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2 \hbar^2 n_H^2} - \left(- \frac{m Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2 \hbar^2 n_L^2} \right)$$

$$\Delta E = E_{n_H} - E_{n_L} = \frac{m Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2 \hbar^2 n_L^2} - \frac{m Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2 \hbar^2 n_H^2}$$

$$\Delta E = E_{n_H} - E_{n_L} = \frac{m Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2 \hbar^2} \left(\frac{1}{n_L^2} - \frac{1}{n_H^2} \right)$$

$$\Delta E = 13.6 \left(\frac{1}{n_L^2} - \frac{1}{n_H^2} \right) \text{ eV} \quad \dots \dots \dots 21$$

$$\therefore \Delta E = h \nu \quad \dots \dots \dots 22$$

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{\frac{m Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2 \hbar^2}}{h} \left(\frac{1}{n_L^2} - \frac{1}{n_H^2} \right)$$

$$\nu = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m Z^2 e^4}{2 \hbar^2} \times \frac{1}{h} \left(\frac{1}{n_L^2} - \frac{1}{n_H^2} \right)$$

$$\nu = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m Z^2 e^4}{2 \times \frac{h^2}{4\pi^2}} \times \frac{1}{h} \left(\frac{1}{n_L^2} - \frac{1}{n_H^2} \right)$$

$$\nu = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \cdot \frac{2 \pi^2 m Z^2 e^4}{h^3} \left(\frac{1}{n_L^2} - \frac{1}{n_H^2} \right) \dots\dots\dots 23$$

$$\lambda = \frac{C}{\nu} \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{C} = \bar{\nu} \dots\dots\dots 24$$

بتعويض معادلة 23 في معادلة 24 سوف نحصل على علاقة حساب العدد الموجي **Wave Number** :

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{C} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \cdot \frac{2 \pi^2 m Z^2 e^4}{h^3 C} \left(\frac{1}{n_L^2} - \frac{1}{n_H^2} \right) \dots\dots\dots 25$$

إكتشف العالم بور إن المقدار $\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \cdot \frac{2 \pi^2 m Z^2 e^4}{h^3 C}$ الموجود في المعادلة رقم 25 يساوي بالضبط قيمة ثابت رايدبيرك R_H .

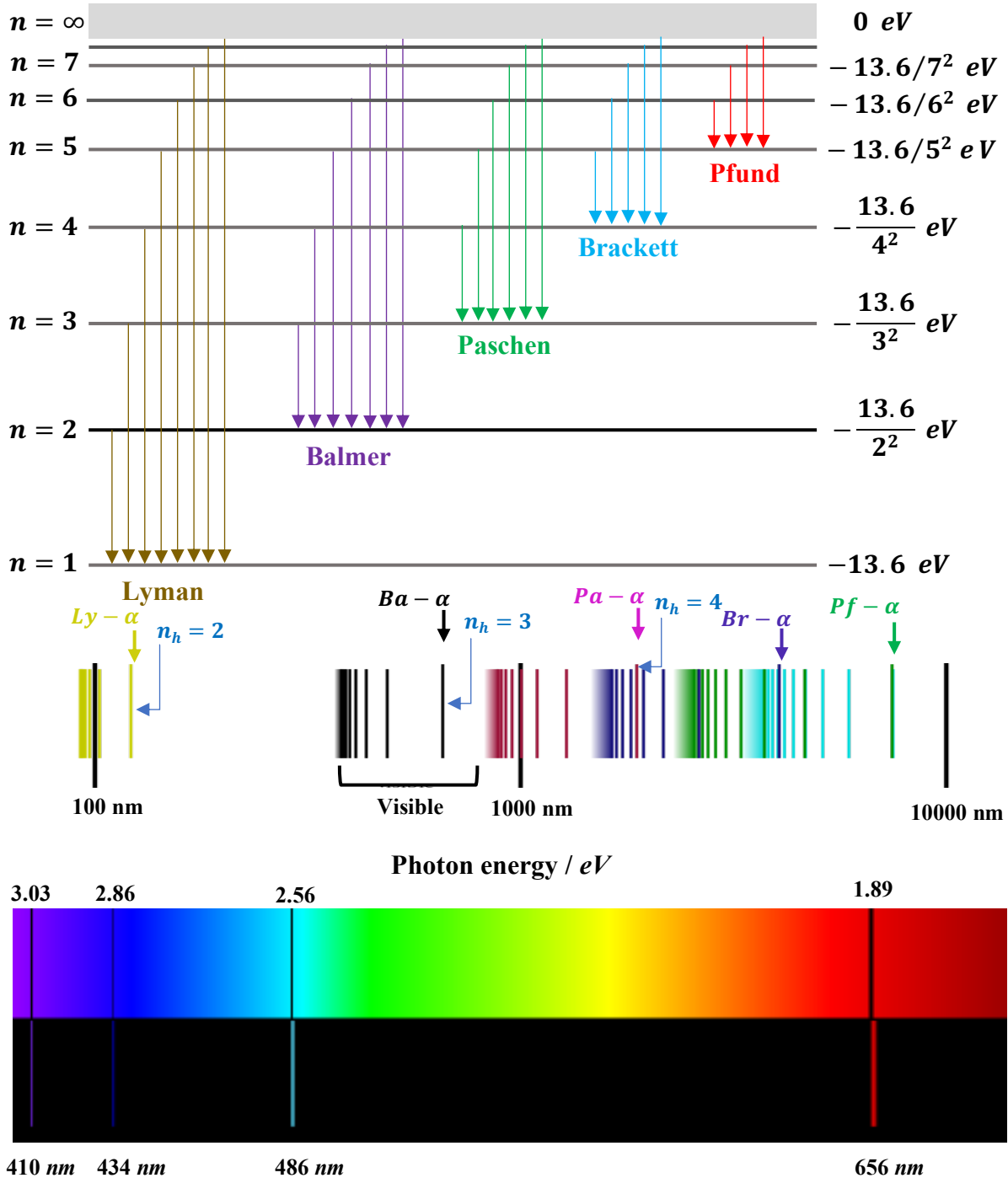
$$R_H = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \cdot \frac{2 \pi^2 m e^4}{h^3 C} \dots\dots\dots 26$$

حيث إن R تمثل ثابت رايدبيرك ($R = Rydbergs\ constant = 1.097 \times 10^7 m^{-1}$)

$$\bar{\nu} = R_H Z^2 \left(\frac{1}{n_L^2} - \frac{1}{n_H^2} \right) \dots\dots\dots 27$$

$$\Delta E = h \nu = h \bar{\nu} C = h C R Z^2 \left(\frac{1}{n_L^2} - \frac{1}{n_H^2} \right) \dots\dots\dots 28$$

استطاع العالم بور بالمعادلات أعلاه تفسير السلاسل الطيفية لذرة الهيدروجين بدقة وحساب مواقع الخطوط الطيفية وأماكنها (جدول 1 . 2) . حيث تم حساب مواقع الخطوط الطيفية العائدة لمجموعة خطوط لايمان Lyman series هي سلسلة من خطوط الطيف تابعة لانتقال الإلكترون في الذرة ، وتظهر تلك الخطوط في حيز الأشعة فوق البنفسجية في طيف ذرة ، أي أن تلك الأشعة لا يمكن رؤياها بالعين البشرية.



خطوط سلسلة بالمر لذرة الهيدروجين Balmer Series for H

أمثلة محلولة

مثال (١) : إحسب قيمة ثابت رايدبيرج وقارن النتيجة مع قيمته العملية والتي تساوي 109677.6 cm^{-1} .

$$R_H = \frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0 c h}$$

$$R_H = \frac{(9.109 \times 10^{-31} \text{ kg}) (1.602 \times 10^{-19} \text{ C})^4}{8 (8.854 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ N}^{-1} \text{ m}^{-1})^2 (3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}) (6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}^{-1})}$$

$$R_H = 1.09737 \times 10^7 \text{ m}^{-1} = 109737 \text{ cm}^{-1}$$

وهذه النتيجة هي أعلى من النتيجة العملية بنسبة 0.5 % وهذا بالتأكيد إتفاق ممتاز .

مثال (٢) : عين التردد ν والطول الموجي λ والعدد الموجي $\bar{\nu}$ لعدد من الإنتقالات الممكنة بين المستويات الطاقة في ذرة الهيدروجين .

$$\bar{\nu} = R Z^2 \left(\frac{1}{n_L^2} - \frac{1}{n_H^2} \right) \quad \text{الحل :}$$

$$(R = \text{Rydbergs constant} = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1} = 109.7 \times 10^5 \text{ cm}^{-1})$$

$$\bar{\nu} = 109.7 \times 10^5 \text{ cm}^{-1} \times (1)^2 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right)$$

$$\bar{\nu} = 15.35 \times 10^5 \text{ cm}^{-1} = 15.35 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

$$\bar{\nu} = \frac{\nu}{C} \Rightarrow 15.35 \times 10^7 \text{ m}^{-1} = \frac{\nu}{3 \times 10^8 \text{ m/s}} \Rightarrow \nu = 46.05 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$$

$$\therefore \nu = \frac{C}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{C}{\nu} = \frac{3 \times 10^8 \text{ m/s}}{46.05 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}} = 65.1 \times 10^{-10} \text{ m}$$

$$\bar{\nu} = 109.7 \times 10^5 \text{ cm}^{-1} \times (1)^2 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{\infty^2} \right)$$

$$\bar{\nu} = 27.42 \times 10^5 \text{ cm}^{-1} = 27.42 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

$$\bar{\nu} = \frac{\nu}{C} \Rightarrow 27.42 \times 10^7 \text{ m}^{-1} = \frac{\nu}{3 \times 10^8 \text{ m/s}} \Rightarrow \nu = 82.26 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$$

$$\lambda = \frac{C}{\nu} = \frac{3 \times 10^8 \text{ m/s}}{82.26 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}} = 36.46 \times 10^{-10} \text{ m}$$

مثال (٣) : امتصت ذرة غاز الهيدروجين في أنبوبة أشعة المهبط طاقة مقدارها 13.223 eV . احسب طاقة المستوى الذي سيثار إليه إلكترون ذرة الهيدروجين وقيمة عدده الكمي الرئيسي .

الحل : طاقة المستوى الأرضي ($n_I = 1$) : $E_I = -13.6 \text{ eV}$

$$\Delta E = E_{n_H} - E_{n_L} \Rightarrow 13.223 \text{ eV} = E_{n_H} - (-13.6 \text{ eV})$$

$$E_{n_H} = 13.223 - 13.6 = -0.377 \text{ eV}$$

$$E_n = -\frac{13.6}{n^2} \text{ eV} \Rightarrow n^2 = -\frac{13.6 \text{ eV}}{E_n} = -\frac{13.6 \text{ eV}}{-0.377 \text{ eV}} = 36 \Rightarrow n = 6$$

مثال (٥) : احسب كمية التحرك لإلكترون ذرة الهيدروجين في المستوى الخامس .

$$L = n \hbar = n \times \frac{h}{2\pi} = 5 \times \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}}{2 \times 3.14} = 5.27 \times 10^{-34} \text{ J s}$$

مثال (٩) : إثبت إن طاقة تأين ذرة الهيدروجين تساوي طاقة الإلكترون بالمستوى الأول .

الحل : عندما تكون الذرة غير مثارة فإن الإلكترون سيظل بالمستوى الأول وعندما يكتسب طاقة من مصدر خارجي ، ينطلق هذا الإلكترون إلى المستويات الأبعد عن النواة ، ولحساب طاقة التأين :

$$\therefore \bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H Z^2 \left(\frac{1}{n_L^2} - \frac{1}{n_H^2} \right)$$

عندما تتأين الذرة فإن الإلكترون يغادر الذرة تماماً ولذلك يعتبر الإلكترون حرّاً ونرمز لذلك بالمستوى اللانهائي $n_H = \infty$.

$$\therefore \bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = 1.097 \times 10^7 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{\infty^2} \right) = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

$$\therefore E = h \nu = \frac{h C}{\lambda} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8}{1/1.097 \times 10^7}$$

$$E = 2.18 \times 10^{-18} \text{ Joule} = 13.626 \text{ eV}$$

القيمة أعلاه تمثل طاقة الإلكترون بالمستوى الأول لذرة الهيدروجين .

مثال (١٠) : في حالة الاستقرار لذرة الهيدروجين ($n = 1$) وإعتماداً على نظرية بور ، احسب :

أ- نصف قطر مدار الإلكترون ، ب- الزخم الزاوي للإلكترون .

ج- الزخم الخطي للإلكترون ، د- الطاقة الكلية للإلكترون

الحل :

$$r_n = n^2 r_1$$

$$r_1 = (1)^2 \times 5.29 \times 10^{-11} \text{ m} = 5.29 \times 10^{-11} \text{ m}$$

$$L = \frac{n h}{2 \pi} = \frac{1 \times 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}}{2 \times 3.14} = 1.05 \times 10^{-34} \text{ J . s}$$

$$\therefore L = p r_n \Rightarrow p = \frac{L}{r_n}$$

$$\therefore p = \frac{1.05 \times 10^{-34} \text{ J . s}}{5.29 \times 10^{-11} \text{ m}} = 2 \times 10^{-24} \frac{\text{kg . m}}{\text{s}}$$

$$E_n = \frac{-13.6}{n^2} \text{ eV} \Rightarrow E_1 = \frac{-13.6}{(1)^2} \text{ eV} = -13.6 \text{ eV}$$

مثال (١٨) : احسب طول موجة كرة السلة ذات الكتلة 0.2 kg وسرعتها 10 m/s . ضع تفسير للنتيجة التي سوف تحصل عليها .

الحل :

$$p = m v = 0.2 \text{ kg} \times 10 \text{ m/s} = 2 \frac{\text{kg . m}}{\text{s}}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}}{2 \text{ kg . m/s}} = 3.3 \times 10^{-34} \text{ m}$$

لاحظ إن الطول الموجي الناتج صغير جداً ولا يحمل معنى فيزيائي وخارج نطاق الإكتشاف التجريبي لأن الأجسام الكبيرة لا تظهر طبيعتها الموجية للعيان ولا يحصل لها تداخل بناء وهدام .

مثال (١٩) : ما هو طول موجة دي برولي لكرة تنس كتلتها 70 g وسرعتها 25 m/s .

$$p = m v = 0.07 \text{ kg} \times 25 \text{ m/s} = 1.75 \frac{\text{kg} \cdot \text{m}}{\text{s}} \quad \text{الحل :}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}}{1.75 \text{ kg} \cdot \text{m/s}} = 3.786 \times 10^{-34} \text{ m}$$

مثال (٢١) : إذا تسارع إلكترون خلال فرق جهد مقداره 250 V ، فاحسب مقدار سرعته وطول موجة دي برولي المصاحب له .

$$K_E = 250 \text{ V} = 250 \text{ J/C} = 250 \frac{\text{J}}{\text{C}} \times 1.602 \times 10^{-19} \text{ C} \quad \text{الحل :}$$

$$K_E = 400.5 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$\therefore K_E = \frac{1}{2} m V^2 \Rightarrow V^2 = \frac{2 K_E}{m} = \frac{2 \times 400.5 \times 10^{-19} \text{ J}}{9.1 \times 10^{-31} \text{ Kg}} = 88.021 \times 10^{12}$$

$$V = 9.382 \times 10^6 \text{ m/s}$$

$$\therefore \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m V} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}}{9.1 \times 10^{-31} \text{ Kg} \times 9.382 \times 10^6 \text{ m/s}} = 7.76 \times 10^{-7} \text{ m}$$

مثال (٢٥) : احسب طول موجة دي برولي لإلكترون يتحرك بنسبة 1.0 % من سرعة الضوء .

$$\therefore V = (0.01) (3 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}) = 3 \times 10^6 \text{ m s}^{-1}$$

$$\therefore P = m_e V = (9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}) (3 \times 10^6 \text{ m s}^{-1})$$

$$P = 2.73 \times 10^{-24} \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$$

فإن طول موجة دي برولي لهذا الإلكترون تساوي :

$$\lambda = \frac{h}{P} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}}{2.73 \times 10^{-24} \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}} = 2.43 \times 10^{-10} \text{ m}$$

المؤثرات الكمية Quantum Operators

في الفيزياء ، المؤثر هو دالة لفضاء من الحالات الفيزيائية ، ونتيجة لتطبيقه على الحالة الفيزيائية ، ويتم الحصول الحالة الفيزيائية أخرى، في كثير من الأحيان جنباً إلى جنب مع بعض المعلومات الإضافية ذات الصلة . **في ميكانيكا الكم إذا أردنا إيجاد قيمة أي كمية فيزيائية لجسم ميكروسكوبي فإننا نبحث أولاً عن شكل المؤثر الذي يمثل هذه الكمية الفيزيائية ، ثم نوجد حل معادلة القيمة الملائمة لهذا المؤثر للحصول على القيم الملائمة التي تمثل نتيجة عملية قياس الكمية الفيزيائية . فمثلاً إذا أردنا إيجاد الطاقة الكلية للإلكترون ذرة الهيدروجين ، نوجد أولاً الشكل المناسب لمؤثر الهاملتونيان الذي يمثل الطاقة الكلية للإلكترون محل الدراسة ، ثم نحل معادلة شرودنكر للحصول على القيم الملائمة للطاقة والتي تمثل المقادير المطلوب قياسها . ولكون المؤثرات تلعب دوراً رئيسياً في ميكانيكا الكم سنهتم بدراسة المؤثرات وخواصها والعلاقات الرياضية والفيزيائية بين هذه المؤثرات .**

والمؤثر هو عملية رياضية محددة مثل الإضافة أو الضرب بـ ثابت ويمكن تمثيلها بواسطة رمز خاص يسمى مؤثر (operator) ويعني طلب إجراء عملية رياضية ما على ما يلي هذا الرمز. فالمؤثر هو رمز يستخدم لعمل شيء على ما يتبعه ومن الأمثلة على ذلك :

$$\frac{d}{dx} x^2 , \sin$$

المؤثر هنا هو $\left(\frac{d}{dx}\right)$ يعني طلب إجراء التفاضل الجزئي للدالة التي تلي هذا المؤثر وهي x^2 . كذلك المؤثر $\sin$ يعني طلب حساب قيمة دالة الجيب للزاوية التي تلي هذا المؤثر . وبصوره عامة تميز المؤثرات على الرموز الأخرى بوضع علامة رأس سهم (^) فوقها .

الجدول التالي يحتوي على بعض الكميات الفيزيائية والمؤثرات المناظرة لها في ميكانيكا الكم .

الكمية الفيزيائية	رمزها	المؤثر المناظر
إحداثي الموضع	x	$\hat{x} = x$
مركبة كمية الحركة الخطية	p_x	$\hat{p}_x = -i \hbar \frac{\partial}{\partial x}$
كمية الحركة الخطية	p	$\hat{p} = -i \hbar \nabla$
طاقة الحركة	$K = p^2/2m$	$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$
كمية الحركة المدارية	L	$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$
طاقة الوضع	V	$\hat{V} = V$
الطاقة الكلية	E	$\hat{E} = i \hbar \frac{\partial}{\partial t}$

لنقل مثلاً إننا نريد معرفة العزم p لنظام ما ، ولنفرض أنّ المؤثر الرياضي الخاص بالعزم معروف لدينا وليكن $\hat{p}$. في حالة العزم بالذات، سنجد أنّ تشغيل المؤثر $\hat{p}$ على الدالة Ψ ينتج الدالة Ψ مضروبة بالعزم ، أي :

$$\hat{p} \Psi = p \Psi$$

ولكن كيف نعرف كُنة المؤثر $\hat{p}$ ؟ للإجابة عن هذا السؤال نقوم باشتقاق الدالة الكلية $\Psi(x, t)$ بالنسبة لـ x :

$$\therefore \Psi(x, t) = C \cdot e^{2\pi i x p_x / h} \cdot e^{-2\pi i E t / h}$$

$$\therefore \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} = C \cdot e^{-2\pi i E t / h} \left(2 \pi i \cdot \frac{p_x}{h} \cdot e^{2\pi i x p_x / h} \right) = 2 \pi i \cdot \frac{p_x}{h} \Psi(x, t)$$

$$\therefore p_x \Psi = \frac{h}{2\pi i} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial x} \Rightarrow \hat{p}_x = \frac{h}{2\pi i} \cdot \frac{\partial}{\partial x}$$

المعادلة الأخيرة إذاً، تعطينا مقدار المؤثر الخاص بالمركبة على الحور x للعزم. بنفس الطريقة نحصل على المؤثرين الخاصين بالمركبتين الأخرين للعزم:

$$\hat{p}_y = \frac{h}{2\pi i} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \quad , \quad \hat{p}_z = \frac{h}{2\pi i} \cdot \frac{\partial}{\partial z}$$

وعلى هذا فإنّ المؤثر الخاص بالعزم الكليّ هو:

$$\therefore \vec{p} = \vec{p}_x + \vec{p}_y + \vec{p}_z$$

$$\therefore \hat{p} = \hat{p}_x + \hat{p}_y + \hat{p}_z$$

$$\hat{p} = \frac{h}{2\pi i} \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

في الغالب نستطيع معرفة المؤثر الخاص بأية صفة فيزيائية وذلك من القانون الفيزيائي التقليدي الخاص بتلك الصفة. لنقل مثلاً أنّنا نريد معرفة المؤثر الخاص بطاقة الحركة. نعرف من الفيزياء التقليدية أنّ طاقة الحركة تساوي:

$$E_{Kinetic} = K = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m}$$

$$\hat{K} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = - \frac{h^2}{8m\pi^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

$$\therefore \nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \right) \Rightarrow \nabla^2 (Laplacian Operator) = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

$$\therefore \hat{K} = - \frac{h^2}{8m\pi^2} \nabla^2$$

بإمكاننا الآن تحديد المؤثر الخاص بالطاقة الكلية للنظام والمتمثلة بمجموع طاقتي الوضع والحركة. هذا المؤثر هو المؤثر الهاميلتوني $\hat{H}$:

$$E_{total} = E_{kinetic} + E_{potential} = K + V$$

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} = -\frac{h^2}{8m\pi^2} \nabla^2 + V$$

فرضيات ميكانيكا الكم

أ – الفرضية الأولى : يمكن وصف أي حالة state للنظام بصورة كاملة بواسطة دالة رياضية تسمى بساي Ψ (Psi) تعرف بالدالة الموجية Wave Function أو دالة الحالة State Function . وهي تعبير رياضي يصف الأحوال الممكنة للنظام الفيزيائي وهي دالة لإحداثيات جسيمات النظام وهي أيضا دالة للزمن وهذه الدالة تحتوي على جميع المعلومات الخاصة بالنظام ، ودالة الموجة في حد ذاتها ليس لها معنى فيزيائي ، والمعنى الوحيد المرتبط بها هو إنها تجريد رياضي لحالة النظام . أما المعنى الفيزيائي ، فإنه مرتبط بمربع هذه الدالة .

ب – الفرضية الثانية : يمثل مربع الدالة Ψ^2 أو $\Psi \cdot \Psi^*$ (إذا كانت الدالة معقدة) عند زمن ما ، الاحتمالية Probability أو كثافة الاحتمالية ، وهي محاولة لإضفاء معنى لهذه الدالة . فإذا افترضنا ان النظام هو جسيم يتحرك في الاتجاه x ، فإن مربع الدالة Ψ^2 عند النقطة x يمثل احتمالية وجود الجسيم عند هذه النقطة . أما إذا كنا نبحث عن الاحتمالية في المنطقة المتناهية الصغر الواقعة بين x و $x + dx$ فإنها تعطي بالتعبير $\Psi^2 dx$ وكما توضح العلاقات أدناه :

$$P_{tol.} = \int |\Psi|^2 dx$$

الإحتمالية الكلية لوجود النظام في حالة Ψ في عموم الفضاء المسموح

$$P = \int_{x_1}^{x_2} |\Psi|^2 dx$$

الإحتمالية لوجود النظام في جزء من الفضاء يقع بين x_1 و x_2 المسموح

وحيث إن Ψ يمكن أن تكون دالة معقدة complex function ، وبالتالي فإن مربعها معقد أيضاً ، فإننا لا يمكن أن نستخدم Ψ^2 لتمثيل الاحتمالية في حالة الدوال المعقدة لأن الاحتمالية لابد وأن تكون حقيقية ، وبالتالي فإنه في حالة الدوال المعقدة فإن المقدار الحقيقي يمكن الحصول عليه بضرب الدالة في مرافقها المعقد . وبالطبع فإن مجموع هذه الاحتماليات في الفراغ كله لابد وأن يساوي للواحد الصحيح .

$$\int_{allspace} \Psi^* \cdot \Psi d\tau = 1$$

$\psi \psi^* d\tau$: تمثل احتمالية إيجاد الجسيم في حجم صغير $d\tau$.
 ψ^* : هو المرادف المعقد Complex Conjugate للدالة ψ .

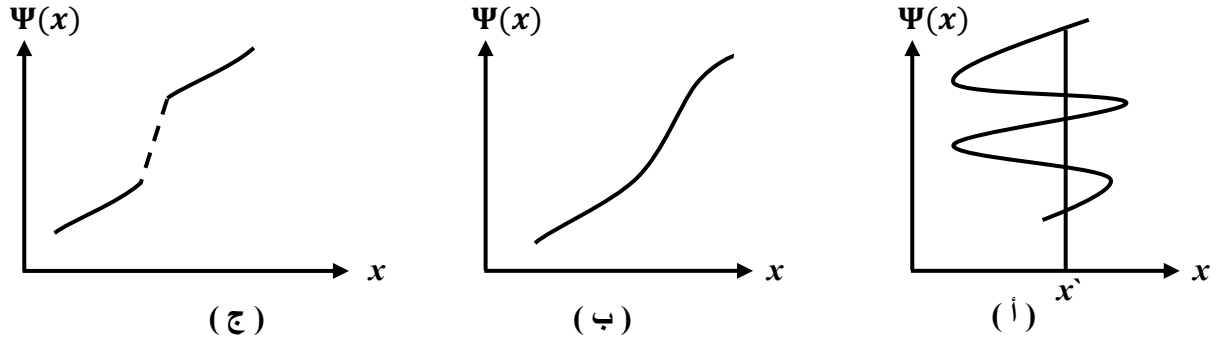
احتمال تواجد جسيم في مكان معين يُعبر عنه في ميكانيكا الكم بعدد بين 1 (موجود 100%) وصفر (غير موجود 0 %) . إذا كانت الدالة Ψ تحقق المعادلة أعلاه فيقال عنها إنها دالة مقومة أو متناسقة **Normalized Function** . إذن مما سبق ذكره ولكي يتحقق هذا الغرض يجب ان تكون احتمالية أن تقع ψ في ψ نفسها هو 100 % . اذا حققت العلاقة أعلاه نقول عنها **إنها دالة مقومة أو دالة متناسقة Normalized Function** . وإذا لم تكن الدالة مقومة **Normalized** يتم ضربها بثابت **Constant**

والشرط الأساسي في اختيارنا للدالة Ψ هو أن تكون دالة حسنة السلوك **well-behaved** وهذا النوع من الدوال الرياضية له الخواص التالية :

١ – أحادية القيمة Single – valued : أي أن الدالة لها قيمة واحدة فقط لكل قيمة من قيم المتغيرات التي تعتمد عليها وهذا يعني ان الدالة لا تتحني على نفسها كما في الشكل (1 . 4 أ) .

٢ – مستمرة Continuous : يجب أن تكون الدالة مستمرة كما في الشكل (1 . 4 ب) ، وليست متقطعة كما في الشكل (1 . 4 ج) . أي تغطي الفراغ المسموح لها بالتواجد فيه ، والذي تحدده القيم القصوى للمتغيرات التي تعتمد عليها الدالة . وهذه الخاصية تعني في الحقيقة أكثر من ذلك ، فلا بد أن يكون المشتق الأول للدالة مستمراً أيضاً .

٣ – محددة القيمة Finite : هذه الخاصية تعني أن الدالة لا يمكن أن تساوي ما لانهاية عند أي نقطة في الفراغ .



الشكل 1 . 4 : يمثل الدالة $\Psi(x)$ بدلالة محور السينات ، حيث ان (أ) يمثل خمس قيم للدالة $\Psi(x)$ عند x' و (ب) يمثل اختلاف الدالة $\Psi(x)$ بصورة مستمرة على محور السينات و (ج) يمثل الدالة $\Psi(x)$ بصورة متقطعة على محور السينات .

ج - الفرضية الثالثة : شرط التعامد Orthogonality condition

ويمكن أن نقول بأن النظام له العديد من الحالات ، وكل حالة من هذه الحالات ، يمكن وصفها وصفاً تاماً بدالة موجة Ψ . أي ان Ψ ماهي إلا مجموعة كاملة (complete set) وعناصرها $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \Psi_n$ حيث Ψ_1 هي دالة الحالة (1) التي تحتوي على جميع المعلومات الخاصة بالنظام وهو في الحالة (1) . ولكن هذه الدالة لا تحتوي على أي معلومة عن النظام وهو في الحالة (2) ، وهذه الحالة الأخيرة توصف وصفاً كاملاً بالدالة Ψ_2 وهكذا ، أي ان Ψ_1 مستقلة تماماً عن Ψ_2 . ويمكن التعبير عن هذه الاستقلالية رياضياً بالتعبير :

$$\int \Psi_m \cdot \Psi_n d\tau = 0$$

All space

هذا التكامل يسمى شرط التعامد Orthogonality condition وهو يعبر عن استقلالية عناصر المجموعة Ψ عن بعضها البعض (إذا اجتمع أي شيئين متناقضين فالنتيجة تساوي صفر) . أي إن التعبير عن هذا الاختفاء يعبر عنه بعلاقة التعامد Orthogonal Relation .

إذا كانت الدالتين متعامدتين ومتناسقة بنفس الوقت عندها تدعى بالزمرة **المقومة المتعامدة Orthonormal**

$$\int \psi_m \psi_n dx = \delta_{mn}$$

هذا التكامل يسمى بتكامل التداخل Overlap Integral .

$$\delta_{mn} = 0 \quad \text{if} \quad m \neq n$$

$$\delta_{mn} = 1 \quad \text{if} \quad m = n$$

δ_{mn} : تسمى دلتا كرونكر Kronecker delta . وتعمل على تفسير جميع الحدود إلا حد واحد بمعنى إن الرمز Σ سوف يختفي ويحول n الى m . ، أي ان كل الحدود تساوي صفر إلا واحد الذي تكون فيه $n = m$.

د - الفرضية الرابعة : معادلة القيمة الذاتية Eigen value equations

معادلة القيمة الذاتية تعرف بالعلاقة التالية :

$$\begin{array}{ccc} \text{eigenfunction} & & \text{eigenfunction} \\ \downarrow & & \downarrow \\ \hat{A} & \Psi_n(x) = a_n & \Psi_n(x) \\ \uparrow & \uparrow & \\ \text{operator} & \text{eigenvalue} & \end{array}$$

حيث إن **هو المؤثر $\hat{A}$ (Operator) الذي يؤثر على الدالة $\Psi_n(x)$ (eigenfunction) وتكون النتيجة** ظهور نفس الدالة مضروبة بمقدار ثابت **a_n (eigenvalue)** وفي مثل هذه الحالة تدعى الدالة بالدالة الذاتية والثابت بالقيمة الذاتية . حيث a_n هو القيمة الذاتية للمؤثر $\hat{A}$ ، $\Psi_n(x)$ هو الدالة الذاتية المقابلة للقيمة الذاتية . والدوال الذاتية هي تلك الدوال الخاصة التي تبقى بدون تغيير بعد عملية تأثير المؤثر.

والتفسير الفيزيائي لمعادلة القيمة الذاتية هو ان المؤثر $\hat{A}$ يقوم بقياس الصفة الفيزيائية التي يمثلها النظام الموصوف بدالة الموجة $\Psi_n(x)$ والمتواجد في الحالة الكمية n ، ونتيجة عملية القياس هي القيمة المميزة أو الذاتية a_n . فعندما يؤثر مؤثر الزخم $\hat{p}$ على النظام الموصوف بالدالة $\Psi_n(x)$ والموجود في الحالة الكمية n فإنه يقوم بقياس الزخم p للنظام في تلك الحالة . أما تأثير المؤثر الهاملتوني $\hat{H}$ فإنه سوف يقوم بقياس الطاقة للنظام وكما موضح في العلاقات أدناه :

$$\hat{p} \Psi_n = p_n \Psi_n$$

$$\hat{p}^2 \Psi_n = p_n^2 \Psi_n$$

$$\hat{H} \Psi_n = E_n \Psi_n$$

هـ – **الفرضية الخامسة** : إذا كانت دالة الموجة Ψ تمثل مجموعة من أحوال الجسيم يجب وضع مبدأ يسمى **بمبدأ التراكب Principle of Superposition** . بمعنى إنه إذا كانت ψ_n هي دوال ذاتية للمؤثر الكمي $\hat{A}$ فإننا يمكن أن نشق الدالة Ψ والتي تكون عبارة عن جمع خطي linear combination لهذه الدوال :

$$\Psi = \sum_n a_n \psi_n$$

ψ_n : هي الأحوال الممكنة للنظام الذي تمثله Ψ .

a_n : هي معاملات لها علاقة باحتمالية وجود ψ في الحالة ψ_n . أي ان هذه المعاملات تعبر عن وزن هذه الدوال في الجمع الخطي للدالة الكلية Ψ . أي إننا استخدمنا المجموعة الكاملة للدوال الذاتية للمؤثر الكمي لبناء دالة جديدة .

هو مبدأ أساسي في ميكانيكا الكم . ينص على أن أي حالتين كموميتين أو أكثر يمكن أن يندمجا (يتراكبا) كما تفعل الموجات في الفيزياء الكلاسيكية ، وستكون النتيجة حالة كمومية أخرى. وعلى العكس ، يمكن التعبير عن كل حالة كمومية كمحصلة حالتين مختلفتين أو أكثر . من أمثلة الظواهر الفيزيائية المشاهدة عن الطبيعة الموجية للنظم الكمية تداخل قمم شعاع الإلكترون في تجربة الشق المزدوج .

حساب قيمة المعاملات a_n :

$$\because \Psi = \sum_n a_n \psi_n$$

بضرب طرفي العلاقة بالدالة الموجية ψ_m نحصل على :

$$\psi_m \Psi = \sum_n a_n \psi_n \psi_m$$

بأخذ تكامل الطرفين :

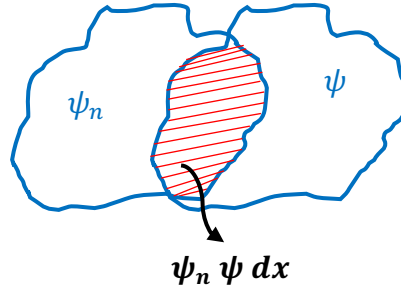
$$\int \psi_m \Psi = \sum_n a_n \int \psi_n \psi_m dx$$

$$\int \psi_m \Psi = \sum_n a_n \int \psi_n \psi_m dx$$

$$\because \int \psi_m \psi_n dx = \delta_{mn}$$

$$\therefore \int \psi_m \psi = \sum_n a_n \delta_{mn} = a_m$$

$$\therefore a_n = \int \psi_n \psi dx$$



$\psi_n \psi dx$: تمثل مدى تداخل ψ مع ψ_n .

بصورة أدق يستخدم التعبير $|a_n|^2$ وهي تمثل احتمالية أن تكون ψ في الحالة ψ_n .

و – الفرضية السادسة : القيم المتوقعة للخواص Expectation Values

إذا لم تكن دالة الحالة Ψ دالة ذاتية للمؤثر الكمي المقابل لخاصية ما ، فإنه لا يمكن التنبؤ بنتيجة عملية القياس في مثل هذه الحالة لذلك من الممكن تعيين القيمة المتوسطة أو معدل القيمة لهذه الخاصية والذي يسمى في ميكانيك الكم بالقيمة المتوقعة والتي يمكن التعبير عنها بالعلاقة التالية :

$$< A > = \frac{\int \psi^* \hat{A} \psi d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau}$$

التكامل هنا يغطي حدود الفضاء المسموح . وإذا كانت الدالة مقومة تصبح العلاقة كما موضح في أدناه كون المقام يكون مساوي للواحد :

$$\therefore \int \psi^* \cdot \psi d\tau = 1$$

$$\therefore < A > = \int \psi^* \hat{A} \psi d\tau$$

وتستخدم الأقواس $\langle \rangle$ للتعبير عن القيمة المتوقعة expectation value . وحيث إن علاقة حساب القيمة المتوقعة هي إحدى فرضيات نظرية الكم ، فإننا لا نستطيع أن نقدم إثباتاً رياضياً له . ولكننا نحاول أن نتفهمه بصورة أعمق وأوضح . نفترض أولاً أن الدالة ψ كانت دالة ذاتية للمؤثر $\hat{A}$ ، لذلك فإن :

$$\therefore \langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d\tau = \int \psi^* A \psi d\tau = A \int \psi^* \psi d\tau$$

$$\therefore \int \psi^* \cdot \psi d\tau = 1 \Rightarrow \therefore \langle A \rangle = A$$

أي إن القيمة المتوسطة للخاصية $\langle A \rangle$ تساوي القيمة العددية المطلقة لها في حالة ما إذا كانت الدالة ψ دالة ذاتية للمؤثر الكمي .

أمثلة محلولة

مثال: أوجد قيمة الثابت C (ثابت التقويم) للدالة الموجية أدناه :

$$\Psi(\phi) = C e^{i m \phi} \quad , \quad m = \text{constant} \quad , \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi$$

الحل : لكي تكون الدالة مقومة يجب أن تحقق الشرط التالي :

$$\int \Psi^*(\phi) \Psi(\phi) d\phi = 1$$

$$\int_0^{2\pi} C e^{-i m \phi} \cdot C e^{i m \phi} d\phi = 1 \Rightarrow |C|^2 \int_0^{2\pi} d\phi = 1$$

$$|C|^2 \times [2\pi - 0] = 1 \Rightarrow 2\pi |C|^2 = 1$$

$$\therefore |C|^2 = \frac{1}{2\pi} \Rightarrow |C| = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\therefore \Psi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i m \phi}$$

مثال : موجة متناسقة مصاحبة لجسيم معرفة في المدى (0 , L) بالعلاقة :

$$\psi(x) = C \sin(bx)$$

حيث $b = \pi/L$ ، إحسب :

(أ) ثابت التناسق أو العيارية C .

(ب) إحصائية وجود الجسيم في المدى $0 \rightarrow L/2$.

(ج) إحصائية وجود الجسيم في المدى $0.25 L \rightarrow 0.75 L$.

الحل : ثابت التناسق يحسب من التكامل :

$$\begin{aligned} \int_0^L \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx = 1 &\Rightarrow \int_0^L C \sin(bx) \cdot C \sin(bx) dx = 1 \\ C^2 \int_0^L \sin^2(bx) dx = 1 &\Rightarrow \frac{C^2}{2} \left[x - \frac{\sin(2bx)}{(2b)} \right]_0^L = 1 \Rightarrow \frac{C^2}{2} (L) = 1 \\ \therefore C^2 \left(\frac{L}{2} \right) = 1 &\Rightarrow C = \sqrt{\frac{2}{L}} \end{aligned}$$

لحساب إحصائية وجود الجسيم في مدى محدد ، مثلاً $\{a \leq x \leq b\}$ ، نستخدم التعريف :

$$\begin{aligned} Prob \{a \leq x \leq b\} &= \int_a^b \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx = 1 \\ \therefore \psi(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n \cdot \pi}{L}\right) \\ \therefore Prob \{a \leq x \leq b\} &= \int_a^b \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n \cdot \pi}{L}\right) \cdot \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n \cdot \pi}{L}\right) dx \end{aligned}$$

$$\therefore Prob = \frac{2}{L} \int_a^b \sin^2\left(\frac{n\pi}{L} x\right) dx = \left| \frac{x}{L} - \frac{1}{2\pi n} \sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) \right|_a^b$$

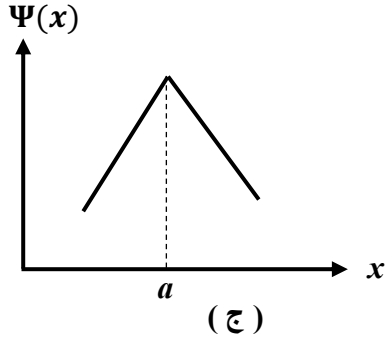
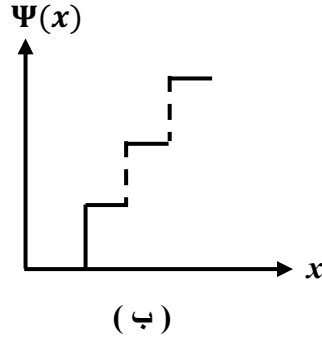
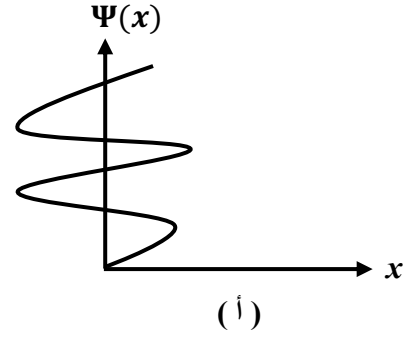
في المدى $L/2 \rightarrow 0$ ، نحصل على :

$$\therefore Prob\{0 \leq x \leq L/2\} = \left| \frac{x}{L} - \frac{1}{2\pi n} \sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) \right|_0^{L/2} = \frac{1}{2}$$

في المدى $0.75 L \rightarrow 0.25 L$ ، نحصل على :

$$\therefore Prob\{0.25 L \leq x \leq 0.75 L\} = \left| \frac{x}{L} - \frac{1}{2\pi n} \sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) \right|_{0.25 L}^{0.75 L} = 0.818$$

مثال : وضح لماذا لا تحقق الأشكال الآتية شروط ميكانيكا الكم ؟



الحل : الأشكال لا تحقق شروط ميكانيكا الكم للأسباب التالية :

(أ) الدالة $\Psi(x)$ متعددة القيم ، حيث إن لكل قيمة x يوجد عدد لانهائي من قيم $\Psi(x)$.

(ب) الدالة $\Psi(x)$ غير متصلة .

(ج) الميل (المشتقة الأولى) للدالة $\Psi(x)$ غير متصل عند النقطة $x = a$.

مثال : هل المؤثر $\frac{d^2}{dx^2}$ والدالة $\sin(\alpha x)$ يكونان معادلة قيمة ذاتية ؟

الحل : باستخدام المؤثر التفاضلي $\frac{d^2}{dx^2}$ على الدالة $\sin(\alpha x)$ نجد إن :

$$\frac{d^2}{dx^2} [\sin(\alpha x)] = -\alpha^2 [\sin(\alpha x)]$$

ومنها نستنتج ان المؤثر $\frac{d^2}{dx^2}$ والدالة $\sin(\alpha x)$ يكونان معادلة قيمة ذاتية ، والقيمة المميزة لها هي $-\alpha^2$ والتي تمثل القيمة الذاتية (eigenvalue) .

مثال : إثبت ان الدالة $\psi = A e^{-\alpha x}$ هي دالة ذاتية للمؤثر $\hat{F} = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x} \cdot \frac{d}{dx} + \frac{2\alpha}{x}$ حيث إن A ، α ثوابت .

$$\hat{F} \psi = \frac{d^2}{dx^2} (A e^{-\alpha x}) + \frac{2}{x} \cdot \frac{d}{dx} (A e^{-\alpha x}) + \frac{2\alpha}{x} (A e^{-\alpha x}) \quad \text{الحل :}$$

$$\hat{F} \psi = \alpha^2 A e^{-\alpha x} + \frac{2}{x} \cdot \frac{d}{dx} (-\alpha A e^{-\alpha x}) + \frac{2\alpha}{x} (A e^{-\alpha x})$$

$$\hat{F} \psi = \left(\alpha^2 - \frac{2\alpha}{x} + \frac{2\alpha}{x} \right) A e^{-\alpha x}$$

$$\hat{F} \psi = \alpha^2 A e^{-\alpha x}$$

$$\hat{F} \psi = \alpha^2 \psi$$

أي إن الدالة ψ هي دالة ذاتية وبقية ذاتية α^2 .

تطبيقات معادلة شرودنكر (حلول دقيقة لمعادلة شرودنكر)

الحركة الانتقالية Translational motion

أولاً : الجسيم الحر أو الطليق Free Particle

معادلة شرودنكر المعتمدة على الزمن : 1

$$\hat{H} \psi_{(x,y,z)} = E \psi_{(x,y,z)} \quad \dots \dots \dots 2$$

بما ان الجسيم حر فان الجهد الذي يتحرك به يكون مساوي للصفر ، بمعنى ان الطاقة الكامنة تساوي صفر ($\hat{V} = 0$) .

$$\therefore -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_{(x,y,z)} = E \psi_{(x,y,z)} \quad \dots \dots \dots 3$$

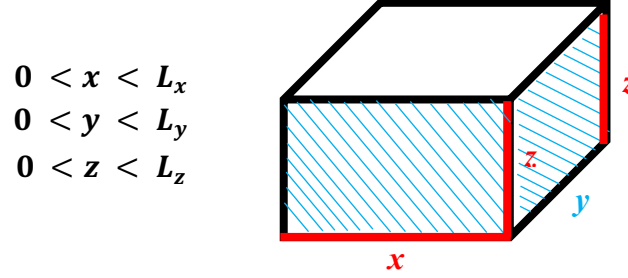
بما ان الجسيم حر فهو حر الحركة في المنطقة من ($-\infty \leq x \leq +\infty$) :

$$\therefore \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \cdot \psi^*(x) = \infty$$

هذه المعادلة غير مقبولة فيزيائياً ولا يمكن تعيين ثابت المعايرة (ثابت القويم) للدالة الموجية ، أي ان المعادلة أعلاه تقرر حالة الجسيم الحر حالة غير واقعية إذ لا يمكن أن يوجد جسيم لا يتداخل مع الجسيمات الأخرى أو مع محيطه .

ثانياً : جسيم في صندوق A particle in a box

ان أبسط الأمثلة ذات الأهمية الفيزيائية هو جسيم مجبر على الحركة في منطقة محدودة من الفراغ . مثال على هذا النظام هو الكترون مجبر على الحركة في رابطة بين ذرتين . أخذت هذه المنطقة المحددة على أساس انها صندوق متوازي المستطيلات أبعاده الثلاثة L_x ، L_y ، L_z (شكل 1 . 5) . بفرض ان جدران الصندوق قوية جداً بحيث ان الجسيم لا يستطيع الخروج من الصندوق .



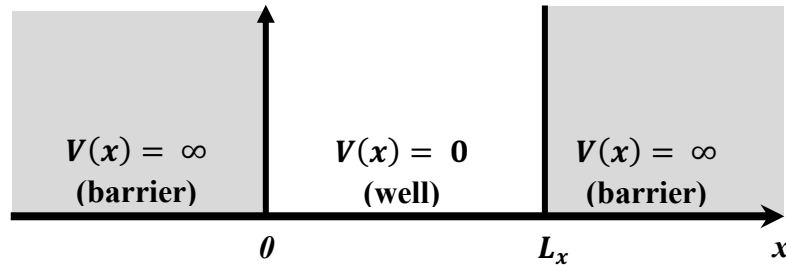
لغرض تبسيط المسألة نأخذ بعد واحد فقط على محور x . يجب أولاً تعريف حالات الجهد : Potential

أولاً : الجهد أو الطاقة الكامنة للجسيم الحر هنا (داخل الصندوق) يساوي صفر كونه حر الحركة :

$$0 \leq x \leq L_x \Rightarrow V = 0 \text{ (داخل الصندوق)}$$

ثانياً : أما قيمة الجهد عند حافة جدار الصندوق أو خارج الصندوق تكون قيمته مساوية للمما لانهاية :

$$x < 0 \Rightarrow V = \infty$$



جسيم يتحرك ببعد واحد داخل جدران لا يمكن اختراقها ، يمثل V_{∞} حائط الصندوق ويبلغ الجهد داخل الصندوق صفراً حيث طاقة الجهد صفر بين $x = 0$ و $x = L$ ويرتفع بشكل مفاجئ الى اللانهاية حالما يلامس الجدران .

عند تطبيق معادلة شرودنكر على الحالة الثانية (خارج الصندوق) $V = \infty$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_{(x,y,z)} + V \psi_{(x,y,z)} = E \psi_{(x,y,z)} \quad \dots \dots \dots 1$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_{(x,y,z)} + \infty \psi_{(x,y,z)} = E \psi_{(x,y,z)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_{(x,y,z)} = E \psi_{(x,y,z)} - \infty \psi_{(x,y,z)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_{(x,y,z)} = (E - \infty) \psi_{(x,y,z)}$$

بما ان E هي بوضوح صغيرة جداً بالمقارنة مع ∞ لذلك ستهمل .

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_{(x,y,z)} = \infty \psi_{(x,y,z)} \quad \dots \dots \dots 2$$

وهكذا يتضح بانه لا توجد دالة محددة وأحادية القيمة وبالإمكان تكامل مربعها يمكنها أن تناسب المعادلة أعلاه . وهذا يعني ان $(\psi = 0)$ خارج الصندوق وبالتالي فان احتمالية إيجاد الجسيم في تلك المنطقة تساوي صفراً ، وهذا ما نتوقعه $(\psi^2 dx = 0)$.

عند تطبيق معادلة شرودنكر على الحالة الأولى (جسيم داخل الصندوق) $V = 0$:

للتبسيط نأخذ بعد واحد على محور x .

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V \psi(x) = E \psi(x) \quad \dots \dots \dots 1$$

$$\because V = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = E \psi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \cdot \psi(x) \quad \dots \dots \dots 2$$

لنفرض α^2 تمثل الكمية الثابتة :

$$\alpha^2 = \frac{2 m E}{\hbar^2} \quad \dots \dots \dots 3$$

$$\therefore \frac{\partial^2 \psi (x)}{\partial x^2} = - \alpha^2 . \psi (x) \quad \dots \dots \dots 4$$

لأجل حل معادلة رقم 4 ، نحتاج الى دالة معينة عند إجراء التفاضل عليها مرتين سوف تعطينا معادلة رقم 4 نفسها مضروبة في كمية ثابتة .

نجرب الدالة رقم 6 ، حيث A ثابت .

$$\psi (x) = A \sin \alpha x \quad \dots \dots \dots 5$$

$$\frac{\partial \psi (x)}{\partial x} = \alpha A \cos \alpha x$$

$$\frac{\partial^2 \psi (x)}{\partial x^2} = - \alpha^2 A \sin \alpha x \quad \dots \dots \dots 6$$

بتعويض معادلة رقم 5 في معادلة رقم 6 ينتج :

$$\frac{\partial^2 \psi (x)}{\partial x^2} = - \alpha^2 \psi (x) \quad \dots \dots \dots 7$$

عند مقارنة معادلتني 4 و 7 فأننا سنرى بان معادلة رقم 5 هي الحل لمعادلة 4 . لحد الآن لم نضع أي قيود على القيم المسموحة للطاقة E في المعادلة رقم 3 . طبعاً القيود على الحلول موجودة عند حافات الصندوق حيث $\psi (x) = 0$. عند الحافات $x = 0$ ، و $L_x = 0$ بحيث يكون :

$$\psi (x) = \psi (0) = 0 \quad \dots \dots \dots 8$$

$$\psi (x) = \psi (L_x) = 0 \quad \dots \dots \dots 9$$

القيود المعطى في معادلة رقم 8 لا يضيف لنا شيئاً جديداً . أذن لنرى ماذا يحدث عندما نستخدم القيد الحدودي الموجود في معادلة رقم 9 :

$$\psi (L_x) = A \sin \alpha L_x \quad \dots \dots \dots 10$$

المعادلة رقم 10 تكون صحيحة فقط عندما تكون :

$$\alpha L_x = n \pi \quad \dots \dots \dots 11 , \quad (n = 1, 2, 3, \dots \dots \dots)$$

$$\alpha = \frac{n \pi}{L_x} \quad \dots \dots \dots 12$$

عند تعويض معادلة رقم 12 في معادلة رقم 3 نحصل على :

$$\frac{n^2 \pi^2}{L^2} = \frac{2 m E}{\hbar^2} , \quad \because \hbar = \frac{h}{2 \pi} \Rightarrow \frac{n^2 \pi^2}{L^2} = \frac{2 m E}{\frac{h^2}{4 \pi^2}}$$

$$L^2 \cdot 2 m E = n^2 \pi^2 \cdot \frac{h^2}{4 \pi^2}$$

$$\therefore E = \frac{n^2 h^2}{8 m L^2} \quad \dots \dots \dots 13$$

حيث ان n : يسمى بعدد الكم الرئيسي quantum number . والمعادلة رقم 13 توضح بان الطاقة ستمتلك فقط قيماً منفصلة discrete values ، وهكذا عند تطبيق الشروط أو القيود الحدودية على حلول معادلة شرودنكر تؤدي الى ظهور أعداد الكم .

عند تعويض معادلة رقم 12 في معادلة رقم 5 نحصل على :

$$\psi(x) = A \sin \frac{n \pi x}{L} \quad \dots \dots \dots 14$$

الآن لنحاول إيجاد الثابت A ، باستخدام شروط التناسق الذي ينص (إن احتمالية إيجاد الجسيم في مكان ما من الفراغ تساوي واحد).

$$\int_0^L |\psi|^2 dx = 1 \quad \dots \dots \dots 15$$

$$\int_0^a |A|^2 \sin^2 \frac{n \pi x}{L} = |A|^2 \int_0^a \sin^2 \frac{2 \pi x}{a}$$

$$\because \sin^2 x = \frac{1}{2} (1 - \cos 2x)$$

$$\therefore \frac{|A|^2}{2} \int_0^a (1 - \cos \frac{2 n \pi x}{a}) = \frac{|A|^2}{2} (a) = 1$$

$$\therefore |A| = \left(\frac{2}{a} \right)^{\frac{1}{2}}$$

بالتعويض عن قيمة $|A|$ في المعادلة رقم 14 نحصل على :

$$\psi(x) = \left(\frac{2}{a} \right)^{\frac{1}{2}} \sin \frac{n \pi x}{a}$$

بالتعويض عن قيمة a بدل L في معادلة رقم 13 نحصل على :

$$\therefore E_{n,x} = \frac{n_x^2 h^2}{8 m a^2}$$

عند استخدام المحاور الثلاثة :

$$E_x = \frac{n_x^2 h^2}{8 m a^2} , \quad \therefore E_y = \frac{n_y^2 h^2}{8 m a^2} , \quad \therefore E_z = \frac{n_z^2 h^2}{8 m a^2}$$

والآن لحساب الطاقة الكلية :

$$E = E_x + E_y + E_z$$

على فرض ان حافات الصندوق متساوية الأطوال أي ان : $a = b = c$

$$E = \frac{h^2}{8 m a^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$\psi(x, y, z) = \psi(x) \cdot \psi(y) \cdot \psi(z)$$

$$\psi(x, y, z) = \left(\frac{8}{a b c} \right)^{\frac{1}{2}} \sin \frac{n_x \pi x}{a} \cdot \sin \frac{n_y \pi y}{b} \sin \frac{n_z \pi z}{c}$$

المقارنة بين صورتَي ميكانيكا الكم والميكانيكا الكلاسيكية

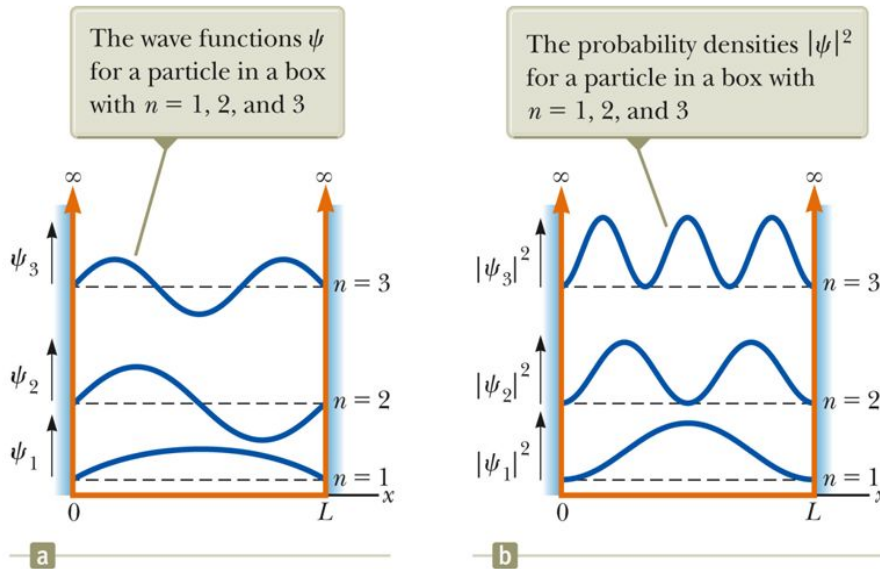
أولاً : وفقاً للصورة الكلاسيكية طاقة الجسم تأخذ أي عدد من صفر وصاعداً . وفقاً لميكانيكا الكم فإن الطاقة تقبل فقط القيم المعطاة في المعادلة 13 :

$$E = \begin{matrix} \frac{h^2}{8 m a^2} & \frac{h^2}{2 m a^2} & \frac{9 h^2}{8 m a^2} & \frac{2 h^2}{m a^2} \\ | & | & | & | \\ 0 & n = 1 & n = 2 & n = 3 & n = 4 \end{matrix}$$

فالطاقة إذن هي مكتمة وتأخذ قيمةً محددة منفصلة في ميكانيكا الكم في حين تكون مستمرة في الميكانيكا الكلاسيكية .

ثانياً : إن أقل طاقة minimum energy وفقاً للصورة الكلاسيكية تساوي صفر ، ولكن في ميكانيكا الكم يمتلك الجسم في الصندوق أقل طاقة تساوي $(h^2/8 m a^2)$ وهي أكبر من صفر وهذه الطاقة تسمى طاقة نقطة الصفر Zero – point energy .

ثالثاً : إن الشكل التالي يعطي تمثيلاً تخطيطياً للدالات الموجية ψ وتراكيز الإحتمالية $|\psi|^2$ للحالات المستقرة الثلاث الأولى وهي الحالات التي لها $(n = 1, 2, 3)$ لجسيم في صندوق ومازلنا نعمل باتجاه واحد (شكل 3 . 5) .



يمثل ثلاث مستويات طاقة مع دالاتها لجسيم في صندوق الجهد .

وفقاً للتصور الكلاسيكي تكون جميع المواقع لجسيم في صندوق محتملة بالتساوي ، أي ان تراكيز الاحتمالية يكون منتظماً ومتجانساً على عكس ميكانيكا الكم حيث ان تركيز الاحتمالية هو غير منتظم ولكنه يظهر تذبذبات Oscillations . وعند الحد الذي تكون فيه أعداد الكم n الواسفة للنظام كبيرة جداً تقترب التذبذبات في $|\psi^2|$ من بعضها البعض أكثر فأكثر وبالتالي تصبح بدرجة من التقارب يصعب تمييزها أي إننا سنصل الى نتيجة مماثلة لتلك الكلاسيكية ذات تركيز الاحتمالية المنتظم .

رابعاً : ان النقطة التي عندها تصبح الدالة الموجية صفراً تسمى **العقدة node** وإن عدد العقد يزداد بمقدار 1 لكل زيادة في n .

5.1.4 قابلية الانحلال Degenerate

إن الانحلال في مسألة جسيم في صندوق يظهر عندما نأخذ أبعاد الصندوق على أساس إنها متساوية وعادة ينشأ الانحلال من التماثل Symmetry للنظام . يقال عن المستوى الطاقى الذي يعود لأكثر من حالة State بأنه منحل أو قابل للانحلال Degenerate وان عدد الحالات المختلفة States العائدة لنفس المستوى يمثل درجة الانحلال لذلك المستوى الطاقى .

مثلاً لنأخذ أقل حالة طاقية (طاقة نقطة الصفر) : $(n_x = 1, n_y = 1, n_z = 1)$

$$E = \frac{h^2}{8 m a^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = \frac{3 h^2}{8 m a^2}$$

هذه الحالة يقال عنها أحادية الانحلال $\psi(x, y, z) = \psi(1, 1, 1)$

لنأخذ مثال آخر : $(n_x = 2, n_y = 1, n_z = 1)$

$$E = \frac{3}{4} \cdot \frac{h^2}{m a^2}$$

هذه الحالة يقال عنها ثلاثية الانحلال وكل من هذه الحالات تمتلك طاقة مقدارها $E = \frac{3}{4} \cdot \frac{h^2}{m a^2}$.

$$\psi(x, y, z) \Rightarrow \psi(2, 1, 1), \quad \psi(1, 2, 1), \quad \psi(1, 1, 2)$$

عند النظر الى الحالة : $\psi(2, 1, 1)$ ، تمتلك كثافة احتمالية لإيجاد جسيم مساوية للصفر عند $(x = a/2)$ ولكننا نرى عند هذه النقطة أقصى احتمالية بالنسبة للحالة $\psi(1, 2, 1)$.

حالة الطاقة	كمية الطاقة $\frac{h^2}{8 m a^2}$	الإحصائية
E_{111}	3	أحادي
$E_{112}, E_{211}, E_{121}$	6	ثلاثي
$E_{122}, E_{212}, E_{221}$	9	ثلاثي
$E_{113}, E_{131}, E_{311}$	11	ثلاثي
E_{222}	12	أحادي
$E_{123}, E_{132}, E_{231}, E_{312}, E_{321}$	14	سداسي
$E_{223}, E_{232}, E_{322}$	17	ثلاثي
$E_{233}, E_{332}, E_{323}$	22	ثلاثي
E_{333}	27	أحادي

أمثلة محلولة

مثال (١) : إحصاء طاقة المستوى الأرضي لجسيم كتلته $1 \times 10^{-30} \text{ Kg}$ موجود في صندوق طول ضلعه 10 nm في الحالات التالية :

أ- أحادي البعد ب- ثنائي البعد ج- ثلاثي البعد

$$E_{nx} = \frac{n_x^2 h^2}{8 m a^2} = \frac{1^2 \times (6.626 \times 10^{-34})^2}{8 (1 \times 10^{-30}) (10 \times 10^{-9})^2} = 5.495 \times 10^{-22} \text{ J} \quad \text{الحل :}$$

$$E_{nx,ny} = \frac{h^2}{8 m a^2} (n_x^2 + n_y^2) = \frac{(6.626 \times 10^{-34})^2}{8 (1 \times 10^{-30}) (10 \times 10^{-9})^2} (1^2 + 1^2)$$

$$E_{nx,ny} = 10.99 \times 10^{-22} \text{ J}$$

$$E_{nx,ny,nz} = \frac{h^2}{8 m a^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$E_{nx,ny,nz} = \frac{(6.626 \times 10^{-34})^2}{8 (1 \times 10^{-30})(10 \times 10^{-9})^2} (1^2 + 1^2 + 1^2)$$

$$E_{nx,ny,nz} = 1.648 \times 10^{-21} J$$

مثال (٢) : أوجد الطول الموجي للضوء المنبعث عندما يقفز جسيم (في صندوق وعلى اتجاه واحد) كتلته $1 \times 10^{-27} g$ من $n = 2$ الى $n = 1$ ، علماً بأن $a = 3 A^\circ$.

$$E_1 = \frac{n^2 h^2}{8 m a^2} = \frac{1 \times (6.626 \times 10^{-34} J \cdot s)^2}{8 \times 10^{-27} \times 10^{-3} Kg \times (3 \times 10^{-10} m)^2} \quad \text{الحل :}$$

$$E_1 = 0.609 \times 10^{-18} \frac{J^2 s^2}{Kg m^2}$$

$$\because J = Kg \cdot m^2 \cdot s^{-2}, \quad 1 J = 10^7 erg$$

$$E_1 = 0.609 \times 10^{-18} \frac{J^2 s^2}{Kg m^2} = 0.609 \times 10^{-18} \frac{Kg^2 m^4 s^{-4} s^2}{Kg m^2}$$

$$E_1 = 0.609 \times 10^{-18} Kg m^2 s^{-2} = 0.609 \times 10^{-18} J$$

$$E_1 = 6.09 \times 10^{-19} J = 6.09 \times 10^{-19} \times 10^7 erg = 6.09 \times 10^{-12} erg$$

$$E_2 = \frac{2^2 \times (6.626 \times 10^{-34})^2}{8 \times 10^{-27} \times 10^{-3} \times (3 \times 10^{-10})^2} = 7.317 \times 10^{-18} J$$

$$\Delta E = E_2 - E_1 = 7.317 \times 10^{-18} - 6.09 \times 10^{-19} = 67.08 \times 10^{-19} J$$

$$\Delta E = h \nu = \frac{h C}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{h C}{\Delta E} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8}{67.08 \times 10^{-19}}$$

$$\lambda = 0.3 \times 10^{-7} m = 0.3 \times 10^{-7} \times 10^{10} A^\circ = 300 A^\circ$$

مثال (٣) : إحسب الطاقة بين أقل مستويين طاقيين ($n = 1, n = 2$) لكل مما يلي :

أ- كرة كتلتها 50 g تتحرك على طريق طوله 100 m .

ب- دقيقة ألفا (أي نواة الهيليوم) المتحركة في أنبوبة المعجل طولها 10 m .

ج- الكترون في رابطة طولها $1.5 A^\circ$ ($1.5 \times 10^{-19} m$) وثم قارن بين النتائج .

$$E_1 = \frac{n^2 h^2}{8 m a^2} = \frac{1^2 \times (6.626 \times 10^{-34})^2}{8 (50 \times 10^{-3}) (100)^2} = 1.097 \times 10^{-70} J \quad \text{الحل :}$$

$$E_2 = (n_2)^2 E_1 = 2^2 (1.097 \times 10^{-70}) = 4.388 \times 10^{-70} J$$

$$\Delta E = E_2 - E_1 = 4.388 \times 10^{-70} - 1.097 \times 10^{-70} = 3.291 \times 10^{-70} J$$

نحسب أولاً كتلة دقيقة ألفا :

$$m = \frac{\text{Mass Number}}{\text{Afocatro Number}} = \frac{4 \times 10^{-3}}{6.023 \times 10^{23}} = 0.66 \times 10^{-26} Kg$$

$$E_1 = \frac{n^2 h^2}{8 m a^2} = \frac{1^2 \times (6.626 \times 10^{-34})^2}{8 (0.66 \times 10^{-26}) (10)^2} = 8.26 \times 10^{-44} J$$

$$E_2 = (n_2)^2 E_1 = (2)^2 \times 8.26 \times 10^{-44} = 33 \times 10^{-44} J$$

$$\Delta E = E_2 - E_1 = 33 \times 10^{-44} - 8.26 \times 10^{-44} = 24.74 \times 10^{-44} J$$

$$E_1 = \frac{n^2 h^2}{8 m a^2} = \frac{1^2 \times (6.626 \times 10^{-34})^2}{8 (9.2 \times 10^{-31}) (1.5 \times 10^{-19})^2} = 2.68 \times 10^{-18} J$$

$$E_2 = (n_2)^2 E_1 = 2^2 E_1 = 4 (2.68 \times 10^{-18}) = 10.7 \times 10^{-18} J$$

$$\Delta E = E_2 - E_1 = 10.7 \times 10^{-18} - 2.68 \times 10^{-18} = 8.02 \times 10^{-18} J$$

يتضح مما تقدم أعلاه بان المسافات الطاقية بين المستويات ذات الأهمية هي فقط المبينة في (ج) . في حين أ و ب صغيرة جداً .

مثال (٤) : جسيم كتلته m داخل صندوق مكعب ، يتحرك ببعد واحد من الصندوق . اكتب علاقة حساب القيمة الذاتية eigenvalue والدالة الذاتية eigenfunction . كيف يتم حساب طاقة نقطة الصفر The zero point energy . وماهي الانحلالية The degeneracy للحالة المثارة الأولى والثانية .

الحل : حساب القيمة الذاتية للطاقة لجسيم يتحرك بثلاثة أبعاد من الصندوق بالعلاقة التالية :

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right), n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$$

لذلك فان القيمة الذاتية للطاقة لجسيم يتحرك ببعد واحد تكون :

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

دالة الموجة لجسيم يتحرك في ثلاثة أبعاد داخل الصندوق تعطى بالعلاقة التالية :

$$\Psi_{(x,y,z)} = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin \frac{n_x \pi x}{a} \sin \frac{n_y \pi y}{b} \sin \frac{n_z \pi z}{c}$$

لذلك فان القيمة الذاتية لدالة الموجة لجسيم يتحرك ببعد واحد من الصندوق :

$$\Psi_{(x,y,z)} = \sqrt{\frac{8}{a^3}} \sin \frac{n_x \pi x}{a} \sin \frac{n_y \pi x}{a} \sin \frac{n_z \pi x}{a}$$

يتم حساب طاقة نقطة الصفر عندما تكون : $n_x = n_y = n_z = 1$

$$\text{Zero Point Energy} = E_{n_x, n_y, n_z} = E_{111} = \frac{3 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

الانحلالية للحالة المثارة الأولى : $(1, 1, 2), (1, 2, 1), (2, 1, 1)$: ثلاثية الانحلال

$$E_{112} = E_{121} = E_{211} = \frac{5 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

للحالة المثارة الثانية أيضاً الإنحلالية ثلاثية : (1 , 2 , 2) , (2 , 1 , 2) , (2 , 2 , 1)

$$E_{122} = E_{212} = E_{221} = \frac{9 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

مثال (٥) : إحسب عدد انحلالية المستوى (123) وطاقته .

الحل : يمكن إيجاد عدد حالات الانحلالية بإيجاد عدد التبادليات للأعداد (123) وهي :

$$(123) , (132) , (213) , (231) , (312) , (321)$$

ان عددها يساوي ستة ، أي ان هذا المستوى هو سداسي الإنحلالية وطاقته تساوي :

$$E_{nx,ny,nz} = \frac{h^2}{8 m a^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$E_{123} = \frac{h^2}{8 m a^2} (1^2 + 2^2 + 3^2)$$

$$E_{123} = \frac{14 h^2}{8 m a^2}$$

مثال (٦) : إحسب إحصائية إيجاد جسيم في النصف الأول من الصندوق أحادي البعد في مستوى الطاقة الأرضي

$$\psi(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \frac{n \pi x}{a} \Rightarrow |\psi_{(x)}^2| = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{1 \times \pi \times x}{a} \quad \text{الحل :}$$

$$Probability = P = \int_0^{1/2} |\psi_{(x)}^2| dx = \int_0^{1/2} \frac{2}{a} \sin^2 \left(\frac{1 \times \pi \times x}{a} \right) dx$$

$$P = \frac{2}{a} \int_0^{1/2} \frac{1}{2} (1 - \cos(\frac{2\pi x}{a})) dx = \frac{1}{a} \int_0^{1/2} dx - \frac{1}{a} \int_0^{1/2} \frac{1}{2} [\cos(\frac{2\pi x}{a})]$$

بضرب المعادلة أعلاه بالمقدار $(\frac{2\pi x a}{2\pi x a})$ لتبسيطها ، نحصل على :

$$P = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\pi x} \int_0^{1/2} [\cos(\frac{2\pi x}{a})] \times \frac{2\pi}{a} dx$$

$$P = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\pi x} \left[\sin\left(\frac{2\pi a/2}{a}\right) - 0 \right] = \frac{1}{2} - \frac{0}{2\pi x} = \frac{1}{2} = 50 \%$$

أي ان إحصائية إيجاد الجسيم في النصف الأول من الصندوق هي 50 % .

مثال (٧) : جد الدالة الذاتية للمستوى الأرضي لجسيم في صندوق طول أضلاعه متساوي

$$. a_x = b_y = c_z$$

الحل : يكون المستوى أرضي عندما : $n_x = n_y = n_z = 1$

$$\psi(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \frac{n_x \pi x}{a} , \quad \psi(y) = \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \frac{n_y \pi y}{a} , \quad \psi(z) = \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \frac{n_z \pi z}{a}$$

$$\psi(x, y, z) = \psi(x) \cdot \psi(y) \cdot \psi(z)$$

$$\psi(x, y, z) = \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \frac{n_x \pi x}{a} \cdot \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \frac{n_y \pi y}{a} \cdot \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \frac{n_z \pi z}{a}$$

$$\psi(x, y, z) = \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{3}{2}} \sin \frac{\pi x}{a} \cdot \sin \frac{\pi y}{a} \cdot \sin \frac{\pi z}{a}$$